



# Etude de la conduction électrique dans les diélectriques à forte permittivité utilisés en microélectronique

Jean Coignus

## ► To cite this version:

Jean Coignus. Etude de la conduction électrique dans les diélectriques à forte permittivité utilisés en microélectronique. Micro et nanotechnologies/Microélectronique. Institut National Polytechnique de Grenoble - INPG, 2010. Français. NNT: . tel-00557752v2

**HAL Id: tel-00557752**

**<https://theses.hal.science/tel-00557752v2>**

Submitted on 26 Jan 2011

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ DE GRENOBLE  
INSTITUT POLYTECHNIQUE DE GRENOBLE

N° attribué par la bibliothèque

--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

## THÈSE

pour obtenir le grade de

**DOCTEUR de L'Université de Grenoble**

Spécialité : **Micro et Nano Electronique**

préparée au **Laboratoire de Simulation et de Caractérisation Electrique**  
**du CEA-LETI MINATEC** et à l'**Institut de Microélectronique,**  
**Electromagnétisme et Photonique (IMEP-LAHC)**

dans le cadre de l'École Doctorale **Electronique, Electrotechnique,**  
**Automatisme et Traitement du Signal**

présentée et soutenue publiquement

par

**Jean COIGNUS**

le 26 novembre 2010

**Etude de la conduction électrique dans les diélectriques**  
**à forte permittivité utilisés en microélectronique**

Directeur de thèse : **M. Raphaël CLERC**

Co-encadrant : **M. Charles LEROUX**

Jury

M. PHILIPPE DOLLFUS,	Président
M. JEAN-LUC AUTRAN,	Rapporteur
M. CLAUDIO FIEGNA,	Rapporteur
M. RAPHAËL CLERC,	Directeur de Thèse
M. CHARLES LEROUX,	Co-encadrant de Thèse
M. DAVID ROY,	Invité



*Two electrons are sitting on a bench in the park.*

*Another electron comes walking by and says :*

*"Hi there, can I come sit with you?",*

to which the electrons reply :

“Don’t be ridiculous, we aren’t Bosons.”

Anonyme



# Remerciements

Les travaux présentés dans ce manuscrit sont le fruit d'une collaboration entre l'IMEP-LAHC (laboratoire Grenoble INP - UJF - Université de Savoie), et le Laboratoire de Simulation et de Caractérisation Electrique (LSCE) du CEA-LETI MINATEC.

Avant toute chose, je tiens à exprimer ma reconnaissance aux membres du jury qui ont accepté d'évaluer ces travaux. Merci donc à M. Jean-Luc Autran, professeur à l'Université de Provence - Aix-Marseille 1, pour ses commentaires avisés et la pertinence de ses questions au cours de la soutenance. Je remercie chaleureusement M. Claudio Fiegna, professeur à l'Université de Bologne, d'une part d'avoir fait le déplacement Italie - France en cette journée enneigée, et aussi pour ses commentaires pertinents, que ce soit pendant la soutenance ou par mail.

Je remercie également M. Philippe Dollfus, Directeur de Recherche à l'Institut d'Electronique Fondamentale de Paris, d'avoir accepté de présider ce jury. De même, merci à M. David Roy, ingénieur STMicroelectronics, d'avoir apporté un regard industriel critique sur ces travaux. J'ai grandement apprécié ses commentaires et son intérêt pour cette étude.

Au cours de cette thèse, j'ai eu la chance de bénéficier des compétences de M. Raphaël Clerc (IMEP-LAHC) en modélisation et de M. Charles Leroux (CEA-LETI MINATEC) en caractérisation électrique. J'ai pu mesurer leur grande expertise dans chacun de ces domaines, et cette complémentarité s'est avérée très fructueuse.

Tout d'abord, je tiens à exprimer tous mes remerciements à Charles, qui a encadré cette thèse au quotidien. Tout au long de ces 3 années, j'ai pu apprécier, outre ses compétences, sa constante disponibilité et ses qualités humaines. Son expertise en caractérisation électrique l'a conduit à m'insuffler patience, optimisme et persévérance dans les phases les plus critiques de la thèse, à savoir les mesures à basse température. J'en avais bien besoin, donc merci beaucoup ! J'ai beaucoup appris à son contact, et la formation par la recherche qu'apporte une thèse prend tout son sens dans ce cas. Je n'oublierai pas ces longues discussions techniques autour de quelques tentatives de fits à 80K, ou, à titre plus personnel, autour d'un café au printemps 2009.

Il est tout aussi difficile de résumer en quelques lignes ce que Raphaël a pu m'apporter ses dernières années. En tant qu'étudiant à l'ENSPG d'abord. Le choix de faire une thèse n'est pas étranger à la qualité de l'enseignement délivré par Raphaël, et, déjà à l'époque, j'avais tout particulièrement apprécié son investissement, son écoute et ses efforts pour offrir à chacun de ses étudiants les meilleurs conseils qui soient en fonction de leur envie. En thèse, j'ai pu retrouver ces qualités : une passion communicative de la Recherche et des qualités pédagogiques indéniables. Je n'oublierai pas ces soirées à écrire des équations et des fonctions d'onde sur tableau blanc, à boucler des abstracts 1h avant les deadlines, ou encore ces séances de Mathcad intensives. Le plus souvent, la meilleure des conclusions venait de la / des (biffer

---

la mention appropriée) bière(s) en ville qui suivaient, et qui laissaient alors place à de nombreuses digressions scientifiques, techniques ou sur le monde de la recherche en général.

Au cours de cette thèse, bien que thésard IMEP-LAHC, j’ai essentiellement été présent au CEA. A ce titre, je remercie Fabien Boulanger, chef du LSCE, de m’avoir accueilli dans son laboratoire. Et j’en profite pour m’excuser de ne pas avoir répondu à ses multiples sollicitations d’intégrer son club de plongée ! J’adresse également toute ma sympathie à Gilles Reimbold, encadrant du groupe carac - modèles, pour son investissement constant au cours de ces 3 ans. Grâce à son expertise, il a su poser les bonnes questions aux bons moments, m’encourager dans telle ou telle direction, et me faire prendre du recul quand il le fallait. Je le remercie également vivement pour son aide avant mes entretiens à l’INES ; elle m’a particulièrement touché et illustre parfaitement l’attention que Gilles peut porter aux thésards de son groupe.

Au moment de remercier la personne qui a partagé avec moi le B263 pendant ces 2 dernières années, les mots manquent. Comment m’abaisser à tresser des lauriers à Laurent Brunet (car c’est de lui dont il s’agit), alors qu’il n’a jamais cessé de m’interrompre dans mon travail, de me voler mon agrafeuse, de me tirer des missiles dessus et de se prendre pour une star avec son Best Paper VLSI ? Malgré ces moments pénibles et douloureux, mon statut d’ainé (ou de vieux chauve comme il dirait) et mon charisme certain ont permis de compenser et de rétablir une certaine hiérarchie dans ce bureau. Merci quand même à Lolo pour les courses de chaises, le panier de basket, et d’avoir de temps à autre chanté ensemble “Les Rois du Monde” à tue-tête (désolé Denis d’ailleurs). Seule ombre au tableau, on n’aura jamais réussi à faire passer un canapé pour le bureau par le tourniquet... J’aurais passé en sa compagnie 2 années géniales, et se retourner sur un B263 à moitié vide (et à moitié propre !) le 30 septembre 2010 aura certainement été un des moments les plus difficiles de la thèse.

Je remercie également de tout cœur tous les autres collègues du LSCE. En premier lieu, j’adresse toute ma sympathie à Xavier “Xav” Garros. Impressionnant tant scientifiquement que par sa capacité à ne jamais avoir froid, j’ai apprécié ses qualités humaines et son aide sur certains points précis de cette thèse. On se sera bien marré, que ce soit au boulot ou au cours de cette fameuse soirée à Washington ! Merci également à Mikaël “Mike” Cassé, compagnon de galère du banc cryo, et pas le dernier à rigoler. Rendez-vous aux prochains 10km de Grenoble ! Vincent “je-peux-pas-te-dire” Vidal mériterait une thèse à lui tout seul. Le fait d’avoir lu tout Internet et sa passion pour les nanards en fait un personnage intarissable sur nombre de sujets dont l’interlocuteur n’avait pas idée 5 minutes avant le début de la conversation. Merci à Vincent pour tous ces bons moments passés en sa compagnie, bonne continuation à ST, et à très vite j’espère. Je remercie également chaleureusement Luca Perniola, pour sa sympathie et les bons moments passés en sa compagnie d’une part, ainsi que pour avoir recruté quelques milliers de post-doc pendant ma présence au sein du laboratoire, qui se sont eux aussi avérés de super compagnie. J’ai également eu la chance d’avoir Virginie “Vivi” Verrière pour collègue au cours de cette thèse. Déjà

---

amis de promo avant cette expérience, nous avons pu partager les moments de joie et de galère inhérents à toute thèse. Modèle de persévérance et d’optimisme, je lui souhaite tout plein de bonnes choses pour la suite. Avec Etienne Nowak, nous avons également partagé ces 3 ans de thèse, ainsi que des virées en Toscane et en Tunisie. Merci à lui pour tous ces supers moments. Je souhaite aussi une bonne continuation à Sylvain Baudot, mon co-thésard : bon courage pour la fin de thèse, et à très vite autour d’une mousse. Une pensée également pour ma “chèreuh collègueuh” Nada Bouhri, ex-pensionnaire du B263, et partie en cours de thèse vers de nouveaux horizons. Merci aussi à tous les autres collègues du LSCE : Patrick Grosgeorges pour sa patience et son aide à bidouiller le fameux banc cryo, Jacques Cluzel et Denis Blachier pour leur aide sur les manipes SIAM, Fabienne Allain pour sa gentillesse et sa bonne humeur, Alain Toffoli pour les trop rares pauses piscine entre midi et deux et Rabah Kies. Je n’oublie pas les thésards et post-docs qui sont ou ont été de passage dans le labo : Matthieu Charbonnier, Giovanni Betti Beneventi, Stefania Braga, Riccardo Tisseur, Elisa Vianello, Andrea Fantini, Eddie Tirano, Nikolai Pashkov. Même si je n’ai pas beaucoup travaillé avec eux, je remercie tout l’étage simulation pour leur accueil et leur gentillesse : merci à Marie-Anne Jaud, Hadrien Lepage, Julien Dura, Raphaël Lachaume, Jean-Charles Barbé, Pascal Scheiblin, Olga Cueto, Pierrette Rivallin, Gilles Le Carval et Philippe Blaise.

Estelle Brague mérite largement un paragraphe rien qu’à elle. Très efficace dans ses prérogatives (haaa, cette fameuse mission Lyon - Paris - Washington - Baltimore - New-York - Paris - Lyon, moitié IMEP, moitié CEA...!), notre “super secrétaire” a surtout endossé le rôle réconfortant de “super maman” pour ses thésards. Modèle de gentillesse, de dynamisme et de bonne humeur, je la remercie chaleureusement pour les bons moments passés à squatter l’entrée du 51B, la terrasse ensoleillée du Carré et m’avoir fait découvrir le hockey. Et pardon pour les Rois du monde, la lenteur à remplir Publi-CEA et les nombreux mails inutiles en provenance du B263!

Au sein du CEA-LETI, j’ai également eu l’occasion de travailler, ou simplement d’échanger, avec certaines personnes que je souhaiterais remercier. Merci à François Martin du L2MA pour son aide et les nombreux papiers qu’il a pu m’indiquer, à Robert Truche de l’équipe de caractérisation physique, à Simon Deleonibus pour les nombreux échanges et conseils avisés pendant les journées des thésards ou en conférence, et à Cuiqin Xu pour les quelques échanges que nous avons pu avoir en fin de thèse. Merci aussi à Gabriel Molas (pour les data HfSiON mais surtout pour les soirées et les randos) et Louis Hutin pour sa sympathie, les pauses caracs et son accueil à Berkeley.

A l’IMEP-LAHC, mes remerciements s’adressent en tout premier lieu à M. Gérard Ghibaudo qui m’a chaleureusement accueilli au sein de son laboratoire. Comme les nombreux thésards qui sont passés avant moi, j’ai pu apprécier sa constante disponibilité pour parler de tel modèle, de telle approximation simplificatrice ou pour exhumer d’obscurs papiers des années 70.

Merci aussi à Quentin Rafhay pour m’avoir coaché en début de thèse, et m’avoir souvent rendu de fiers services en enseignement. Quentin a aussi su me prodiguer



---

d'excellents conseils, scientifiques et pédagogiques, et je l'en remercie. Je remercie également Xavier Mescot pour son aide sur le banc cryo de l'IMEP, Martine Gri pour les découpes des échantillons, et toute l'équipe administrative, en particulier Chahla Domenget, Anne Dupuy, Valérie Misciosa et Dalhila Alouani. Une pensée également aux collègues thésards : Christophe "Nob" Martin, Christophe "Titof" Hoarau, Simon Hemour, Louis Gerrier, William Van Den Daele, Thomas Bertaud, Zine Bouhamri, Bertrand Charlet, Thomas Napez...

Une pensée particulière pour ma co-thésarde Manu Buccafuri, avec qui on a partagé de supers moments en Italie, en Grèce, ou tout simplement à Grenoble. Bon courage pour la suite ! Bonne continuation également à Stéphane "Zouave" Altazin, j'espère que nos chemins se croiseront à l'INES très bientôt (non non, ceci n'est pas une piquouze !).

J'ai eu l'opportunité d'exercer mon Monitorat à l'ENSERG tout d'abord, à Phelma ensuite.

A ce titre, je souhaite tout d'abord remercier Jean-Emmanuel Broquin, directeur du Master Nanotech, qui a su être un tuteur présent. J'ai grandement apprécié ses conseils et la confiance qu'il m'a accordée. Merci à toute l'équipe pédagogique de Nanotech pour leur aide, leur sympathie et les nombreux échanges fructueux que j'ai pu avoir avec eux. Je citerais plus particulièrement Youla Morfouli, Quentin Rafhay, Bertrand Charlet, Davide Bucci et Irina Ionica pour leur aide pour les TP techno en salle blanche. Merci aussi à l'équipe technique du CIME Nanotech qui fait un travail remarquable : Stéphane Litaudon, Delphine Constantin et Irène Pheng.

A Phelma, je remercie Fanny Poinssot pour sa bonne humeur et son dynamisme pendant les séances de TP de caractérisation électrique. Merci également à Eric Moisan pour m'avoir donné l'opportunité de donner les TD de Probabilité et Statistiques, et à Georges Pananakakis pour ses conseils et les discussions que nous avons pu avoir à ce sujet.

Cette expérience de Monitorat a été très enrichissante d'un point de vue personnel, et le travail de Mmes Vuillet et Herbelles n'est pas étranger à la qualité de l'enseignement prodigué par le CIES Grenoble.

Merci aussi au professeur Olof Engström et à Bahman Raeissi, de l'université de Chalmers (Göteborg, Suède), pour m'avoir accueilli quelques semaines dans le cadre du projet Nanosil. Outre les nombreux échanges scientifiques que nous avons pu avoir, je remercie de tout cœur Olof pour le temps qu'il a pris à me faire connaître son pays, sa culture et sa gastronomie.

Enfin, comment conclure ces 3 ans sans remercier les potes, les amis, ceux auprès desquels il est bon de couper du boulot, ou de mettre des coups de couteau dans le dos pendant de loooongues parties de Risk (par exemple). Il serait hasardeux de se lancer dans l'énumération exhaustive de tous les gens qui me tiennent à cœur et avec qui je partage mon quotidien depuis pas mal de temps maintenant.

Je tiens quand même à remercier Kawel, le pote de toujours. Bien sûr, comment ne pas mentionner Jo et Pierre, les quasi-colocs que je retrouvais presque tous les

---

soirs après le boulot pour le fameux petit apéro de début de soirée (et qui s’étendait souvent jusqu’à la fin de soirée). Même si Jo s’est barré comme un voleur alors qu’il n’avait pas encore fini de totalement découvrir Grenoble, j’espère bien le voir rappliquer définitivement 1 de ces 4 pour des virées photo (et plus si affinités). Que La Chaîne, Vince, Grom, MM, Beni et Jamin soient également remerciés de tous ces moments passés ensemble, des parties de poker enfumées aux sorties montagne, en passant par les barbeucs et les sessions Trône de Fer.

Mes derniers remerciements s’adressent tout naturellement à ma famille, et notamment mes parents et ma sœur. Ils ont toujours tout simplement assuré, me poussant à persévérer et me faisant totalement confiance dans les choix de vie que j’ai pu faire. Je les remercie de tout cœur, arriver jusqu’ici n’aurait pas été possible sans leur soutien et leur confiance.

Merci également à tous mes grands-parents, supporteurs de la première heure de leurs petits enfants. A l’instant d’écrire ces lignes, j’ai une pensée particulière pour mon grand-père Bernard, qui me découpait encore en début de thèse les articles de la Dépêche du Midi dès lors qu’ils traitaient de “nanotechnologies” ou de la recherche grenobloise. Ce manuscrit de thèse lui est dédié.

Pour finir, comment ne pas remercier ma Liloute, qui a su affronter (et supporter !) une deuxième rédaction de thèse quelques mois après la sienne. Je la remercie pour sa patience, son soutien quotidien et ses conseils, les meilleurs que je puisse recevoir. Maintenant, la thèse c’est fini, et on va bien profiter de la vie ☺



# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction générale</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Modélisation de l'effet de champ</b>	<b>17</b>
1	Principe de la simulation Poisson-Schrödinger . . . . .	19
2	Etat de l'art . . . . .	21
2.1	Historique . . . . .	21
2.2	Description du simulateur développé . . . . .	24
3	Modélisation du confinement quantique . . . . .	27
3.1	L'équation de Poisson . . . . .	27
3.2	L'équation de Schrödinger . . . . .	27
4	Résolution numérique de l'auto-cohérence . . . . .	35
4.1	Convergence de la boucle auto-cohérente . . . . .	35
4.2	Découpage quantique - classique de la structure simulée . . .	36
5	Résultats et discussions . . . . .	39
5.1	Impact de la pénétration des fonctions d'onde . . . . .	39
5.2	Influence de la non-parabolicité de la bande de valence . . . .	48
6	Conclusions du chapitre 2 . . . . .	51
	Bibliographie . . . . .	53
<b>3</b>	<b>Etude de la conduction dans un empilement nMOS HfO<sub>2</sub></b>	<b>59</b>
1	Mécanismes à l'origine du courant de grille . . . . .	61
1.1	Technique de séparation de porteurs . . . . .	61
1.2	Mécanismes de transport dans un diélectrique . . . . .	64
2	Modélisation du courant tunnel . . . . .	68
2.1	Modélisation de la transparence tunnel . . . . .	69
2.2	Modélisation du courant tunnel 2D . . . . .	80
2.3	Modélisation du courant tunnel 3D . . . . .	82
2.4	Influence de la pénétration des fonctions d'onde . . . . .	83
3	Identification des mécanismes de conduction . . . . .	86
3.1	Description des échantillons et méthodologie expérimentale .	86
3.2	Observations expérimentales . . . . .	88
3.3	Conclusions . . . . .	94
4	Extraction de paramètres en régime d'inversion . . . . .	95
4.1	Extraction des épaisseurs physiques . . . . .	96
4.2	Extraction des paramètres tunnel de l'empilement . . . . .	99
4.3	Conclusions . . . . .	103
5	Extraction de paramètres en régime d'accumulation . . . . .	104
5.1	Préambule . . . . .	104
5.2	Structure de bande d'un diélectrique . . . . .	106
5.3	Extraction des masses tunnel Franz dans l'IL et le HfO <sub>2</sub> . . .	111

6	Cohérence inversion - accumulation . . . . .	113
7	Régime Fowler-Nordheim dans $\text{HfO}_2$ . . . . .	117
8	Conclusions du chapitre 3 . . . . .	119
	Bibliographie . . . . .	122
<b>4</b>	<b>Etude des additifs Magnésium et Lanthane</b>	<b>131</b>
1	Etude de l'additif $\text{MgO}$ . . . . .	133
1.1	Introduction . . . . .	133
1.2	Description des structures étudiées . . . . .	134
1.3	Analyse des paramètres $V_{\text{FB}}$ et EOT . . . . .	134
1.4	Analyse physique de l'empilement Magnésium . . . . .	135
1.5	Analyse de la conduction électrique . . . . .	137
1.6	Conclusion de l'étude . . . . .	146
2	Etude de l'additif La . . . . .	147
2.1	Description des empilements étudiés . . . . .	147
2.2	Etat de l'art . . . . .	148
2.3	Influence de l'épaisseur $\text{La}_2\text{O}_3$ (empilements C et D) . . . . .	149
2.4	Influence du procédé de dépôt (empilements D et E) . . . . .	152
2.5	Conclusion de l'étude . . . . .	154
3	Conclusions du chapitre 4 . . . . .	156
	Bibliographie . . . . .	158
<b>5</b>	<b>Modélisation d'interfaces non-abruptes</b>	<b>163</b>
1	Modélisation des interfaces graduelles . . . . .	164
2	Impact sur le confinement et l'extraction d'EOT . . . . .	166
3	Impact sur la simulation du courant tunnel . . . . .	170
3.1	Interface a : Silicium - $\text{SiO}_2$ . . . . .	170
3.2	Interface c : $\text{HfO}_2$ - métal TiN . . . . .	172
3.3	Interface b : $\text{SiO}_2$ - $\text{HfO}_2$ . . . . .	173
4	Conclusions du Chapitre 5 . . . . .	177
	Bibliographie . . . . .	178
<b>6</b>	<b>Conclusion générale</b>	<b>181</b>
<b>Annexes</b>		
<b>A</b>	<b>Notions de physique des dispositifs semi-conducteurs</b>	<b>189</b>
<b>B</b>	<b>Modélisation de la transparence tunnel : approche d'Airy</b>	<b>199</b>
<b>C</b>	<b>Bibliographie de l'auteur</b>	<b>203</b>





# Introduction générale

---

DEPUIS l'invention du circuit intégré en 1958 [1], le principal vecteur de croissance de l'industrie microélectronique Silicium est la miniaturisation des transistors MOSFET<sup>1</sup>. Ce composant est la brique élémentaire de tout circuit logique et concentre à lui seul une grande part des efforts de recherche et développement menés ces dernières décennies pour accroître les performances des circuits intégrés.

Le premier bénéfice de la réduction d'échelle (ou *scaling*) se comprend intuitivement : une plus grande densité d'intégration permet de réaliser des fonctions électroniques plus complexes sur une même surface, et réduit ainsi le coût de fabrication unitaire de chaque transistor. En 1965, Gordon E. Moore édicta sa fameuse loi éponyme, prédisant une augmentation de la densité d'intégration des circuits d'un facteur 2 tous les 2 ans [2]. Cinquante années plus tard, force est de constater que cette conjecture s'est révélée exacte : un circuit Silicium contient aujourd'hui près d'un milliard de transistors (contre moins de 100 dans les années 1960) et l'électronique fait aujourd'hui partie intégrante de notre quotidien.

L'augmentation du nombre de composants sur une puce ne suffit toutefois pas à expliquer la croissance exponentielle des performances des circuits intégrés au fil des générations<sup>2</sup>. Etablies à partir des équations de base de physique des dispositifs semiconducteurs, les lois de scaling à champ constant [3] montrent qu'une réduction des dimensions des transistors d'un facteur  $\alpha > 1$  conduit également à accroître leurs performances du même facteur  $\alpha$  (Tableau 1.1).

Jusqu'à la fin des années 1990, la croissance de l'industrie microélectronique fût portée par le scaling continu d'une architecture "tout Silicium", à savoir substrat Silicium et empilement de grille SiO<sub>2</sub> - Polysilicium. Le choix d'une telle architecture reposait essentiellement sur les excellentes qualités de l'oxyde natif SiO<sub>2</sub> :

- interface avec le Silicium présentant une très faible densité de pièges d'interface ( $< 10^{10} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ ),
- bonne stabilité thermique,
- propriétés isolantes excellentes (largeur de bande interdite de 9 eV),
- faible concentration de défauts volumiques ( $< 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ).

Les défis pour passer d'une génération de composants à une autre résidaient alors essentiellement dans l'optimisation des procédés de fabrication, notamment une maîtrise toujours plus importante des étapes de lithographie (définition précise de  $L_g$

---

1. *Metal-Oxide-Semiconductor Field Effect Transistor* : transistor métal - oxyde - semiconducteur à effet de champ.

2. Une génération de transistor est également appelée *nœud technologique*.



	Paramètres	Facteur multiplicatif ( $\alpha > 1$ )
<b>Dimensionnement</b>	Longueur de grille $L_g$ [m]	$1/\alpha$
	Largeur de grille $W_g$ [m]	$1/\alpha$
	Épaisseur d'oxyde $t_{ox}$ [m]	$1/\alpha$
	Tension d'alimentation $V_{dd}$ [V]	$1/\alpha$
<b>Impact sur le transistor</b>	Champ électrique [V.m <sup>-1</sup> ]	1
	Capacité de grille $C_{ox}$ [F.m <sup>-2</sup> ]	$\alpha$
	Courant $I_{on}$ [A]	$\alpha$
	Temps de réponse $\tau$ [s]	$1/\alpha$
	Densité d'intégration [m <sup>-2</sup> ]	$\alpha^2$

TABLEAU 1.1 – Lois d'échelle à champ constant édictées par Dennard et al. [3].

et  $W_g$ ) et de croissance d'oxyde  $SiO_2$  (bon contrôle de l'épaisseur  $t_{ox}$ ).

La fin du XX<sup>ème</sup> siècle marque toutefois un tournant dans la réduction d'échelle des dispositifs semiconducteurs. Les dimensions caractéristiques des transistors approchent l'échelle nanométrique, et aux difficultés purement technologiques viennent s'ajouter des phénomènes électriques parasites, inhérents à la taille submicronique des composants. Le compromis entre performance et consommation du dispositif devient critique et les efforts d'optimisation se font différents selon qu'on considère un transistor à vocation haute performance (microprocesseurs par exemple) ou basse consommation (applications nomades). Réduire les effets dits “de canal court” est notamment un enjeu majeur : la réduction de la longueur de grille  $L_g$  (entre 50 et 60nm pour le nœud 90nm par exemple) induit une dégradation du contrôle électrostatique de la grille sur le canal, et conduit à augmenter le courant de drain à l'état off  $I_{off}$  [4]. A une époque où seule l'architecture bulk est envisagée pour répondre aux exigences de la loi de Moore, les augmentations conjointes du dopage du canal et de la capacité de grille  $C_{ox}$ <sup>3</sup> s'avèrent être les seuls leviers technologiques pour limiter les niveaux de puissance dissipée à l'état *off*.

Néanmoins, à partir du début des années 2000, le scaling de l'oxyde de grille  $SiO_2$  se heurte à une limite fondamentale. Jusqu'alors négligeable pour des épaisseurs supérieures à 2 nm, le transport de porteurs par effet tunnel dans le  $SiO_2$  induit un courant de grille  $I_g$  important, et contribue à augmenter la puissance dissipée à l'état *on* par le circuit [5]. La Figure 1.1 montre l'augmentation exponentielle du courant de grille à mesure que l'épaisseur d'oxyde diminue. Si pour le nœud 130nm haute-performance [6] le diélectrique  $SiO_2$  remplit les spécifications imposées par

3. On rappelle que la capacité surfacique  $C_{ox}$  d'un diélectrique est inversement proportionnelle à son épaisseur  $t_{ox}$  :  $C_{ox} = \epsilon_{ox}/t_{ox}$  avec  $\epsilon_{ox} = 3,9 \epsilon_0$  dans le cas du  $SiO_2$ .

l'ITRS<sup>4</sup> (courant de grille à  $V_g = V_{dd}$  plus faible que la limite maximum admise), cela n'est plus le cas en 2003 pour le nœud 90nm. La capacité de grille  $C_{ox}$  requise nécessite l'utilisation d'une couche de 1,2 nm de  $SiO_2$ , épaisseur qui s'avère présenter un niveau de courant de grille trop important.

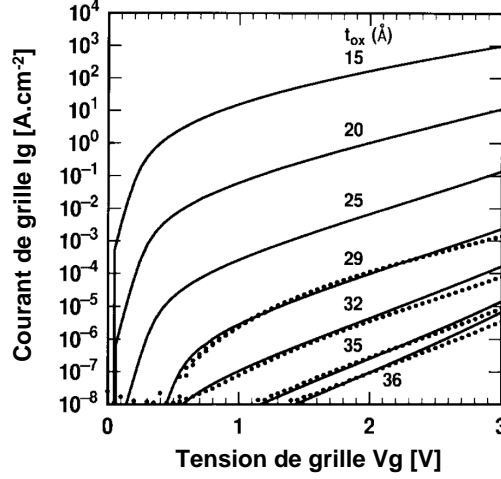


FIGURE 1.1 – Simulation du courant de grille  $I_g$  en fonction de la polarisation de grille  $V_g$  à travers différentes épaisseurs de  $SiO_2$  (données issues de [7]).

Afin de poursuivre la loi de Moore pour les nœuds technologiques 90nm et en-deçà, l'utilisation de diélectriques alternatifs au  $SiO_2$  est indispensable. Le choix d'un matériau dit "high- $\kappa$ ", c'est-à-dire présentant une permittivité diélectrique supérieure à celle du  $SiO_2$ , permet de maintenir une capacité de grille  $C_{ox}$  élevée avec une couche diélectrique  $t_{high-\kappa}$  plus épaisse, et contribue à diminuer les fuites de grille (Figure 1.2).

Pour mesurer le bénéfice de l'introduction d'un diélectrique high- $\kappa$  sur le courant de grille, la notion d'EOT<sup>5</sup> est introduite. Cette grandeur permet de comparer les propriétés conductrices de différents empilements de grille présentant une même capacité, et correspond à l'épaisseur de  $SiO_2$  théoriquement requise pour obtenir une capacité  $C_{ox}$  identique à la capacité d'un empilement high- $\kappa$  :

$$C_{ox} = \frac{\epsilon_{high-\kappa}}{t_{high-\kappa}} = \frac{\epsilon_{SiO_2}}{EOT} \quad (1.1)$$

Pour répondre aux exigences de l'ITRS en terme de fuites de grille à partir du nœud 90nm, l'industrie a tout d'abord envisagé l'oxyde de Silicium nitruré ( $SiON$ )

4. *International Technology Roadmap for Semiconductors* : organisme international établissant les spécifications des nœuds technologiques à venir, et permettant à l'industrie microélectronique de suivre la loi de Moore.

5. *Equivalent Oxide Thickness* : épaisseur équivalente électrique de l'empilement diélectrique, ramenée à la permittivité du  $SiO_2$

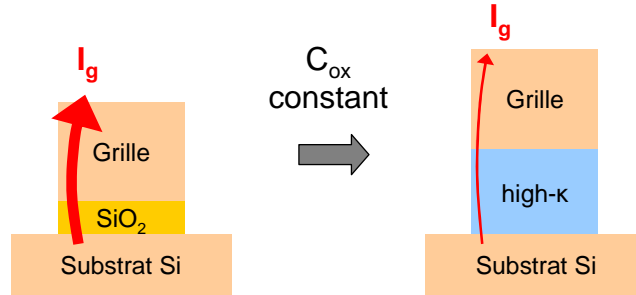


FIGURE 1.2 – Schéma de principe de l'introduction d'un matériau high- $\kappa$  dans un empilement de grille : une limitation de la conduction électrique (flèches rouges) est attendue en raison de l'épaisseur plus importante de la couche diélectrique.

comme alternative au  $\text{SiO}_2$ . Ce matériau présente de multiples avantages, à savoir une intégration simplifiée dans une filière Silicium (simple nitruration du  $\text{SiO}_2$ ) et d'excellentes propriétés électriques, comparables à celles du  $\text{SiO}_2$  précédemment citées. Sa permittivité comprise entre 5 et  $6\epsilon_0$  permet d'obtenir un EOT de 1,2 nm avec une couche déposée comprise entre 1,5 et 2 nm [8] et réduit donc les fuites de grille. Cette approche montre toutefois ses limites dès le nœud 45nm en raison de la trop faible permittivité du  $\text{SiON}$  et d'une dégradation de la fiabilité liée à la présence d'atomes d'azote.

A partir du nœud 45nm, les défis associés à l'optimisation de l'empilement de grille dans une filière Silicium industrielle sont nombreux et ne se limitent pas à l'introduction des matériaux high- $\kappa$ . Le remplacement des grilles polysilicium par des grilles métalliques est également envisagé, permettant d'accroître la capacité grâce à la suppression du phénomène de polydésertion [4]. D'autre part, les diélectriques high- $\kappa$  doivent présenter les propriétés suivantes [9] :

- bonne stabilité thermique en raison des recuits d'activation à haute température inhérents au procédé de fabrication d'un transistor,
- faible densité de défauts chargés (en volume et à l'interface) susceptibles de dégrader la mobilité des porteurs dans le canal de Silicium et la fiabilité de l'empilement,
- compatibilité avec le Silicium et le métal de grille pour garantir une excellente qualité d'interfaces (faible densité de pièges, faible rugosité),
- compatibilité avec les procédés de dépôt standards ALD et MOCVD, majoritairement utilisés dans l'industrie et présentant une excellente conformité des couches déposées.

Ces points mettent en lumière la difficulté d'intégration des diélectriques high- $\kappa$  dans une filière CMOS, auxquels s'ajoute le délicat compromis  $I_g$  vs EOT à atteindre pour respecter les exigences de l'ITRS en terme de fuites de grille. Parmi les candidats potentiels pour succéder au  $\text{SiON}$  à partir du nœud 45nm, les diélectriques à base d'Hafnium ( $\text{HfO}_2$  et silicates  $\text{HfSiON}$  et  $\text{HfSiO}_x$ ) s'avèrent être

les plus prometteurs [10] : thermodynamiquement stables, ils permettent également une baisse importante des fuites de grille par rapport au  $\text{SiO}_2$  (Figure 1.3) grâce à une permittivité supérieure à  $10\epsilon_0$  ( $20\epsilon_0$  dans le cas du  $\text{HfO}_2$ ). Ils sont d'ores et déjà intégrés aux technologies 45nm [11] et 32nm [12]. Ces diélectriques présentent néanmoins une faible barrière à la pénétration d'oxygène, induisant une recroissance d'oxyde  $\text{SiO}_2$  à l'interface Silicium - high- $\kappa$  (quelques angströms d'épaisseur). Bien que favorisant une recroissance d'EOT, ce phénomène est toléré, voire encouragé, par les technologies car il permet de bénéficier des excellentes propriétés d'interface Silicium -  $\text{SiO}_2$ .

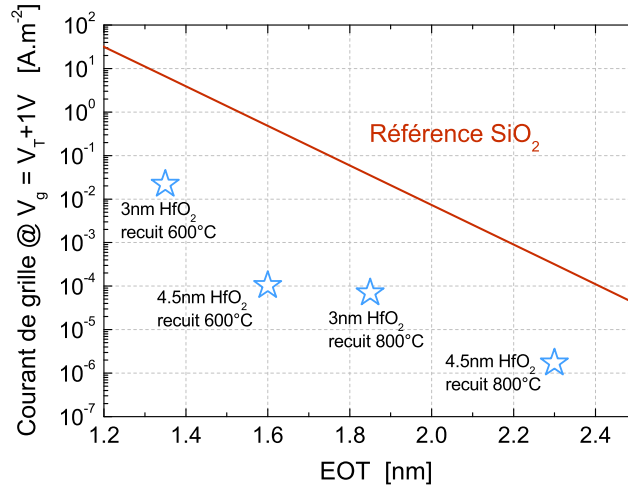


FIGURE 1.3 – Résultats électriques  $I_g(\text{EOT})$  d'empilements  $\text{HfO}_2$  présentant différentes épaisseurs et températures de recuit [13]. La réduction de courant par rapport au  $\text{SiO}_2$  est indéniable mais apparaît fortement variable en fonction des conditions de procédé (les températures indiquées sont celles des recuits post-dépôt).

Le gain en terme de réduction de fuites de grille est certes démontré expérimentalement mais reste toutefois inférieur à ce que l'on aurait pu attendre avec de telles épaisseurs physiques de diélectrique high- $\kappa$ . Le compromis  $I_g$  vs EOT à atteindre ne repose donc pas uniquement sur l'optimisation des épaisseurs physiques de diélectrique, et les points suivants doivent être considérés :

1. L'analyse de différents diélectriques high- $\kappa$  montre une baisse significative de leurs propriétés isolantes à mesure que leur permittivité augmente (Figure 1.4). En effet, outre la dépendance avec l'épaisseur de diélectrique, le transport tunnel est également sensible aux hauteurs de barrière par rapport au Silicium (et donc à la largeur de bande interdite). À épaisseur physique constante, un matériau high- $\kappa$  sera donc plus conducteur que le  $\text{SiO}_2$ , et le bénéfice sur le courant de grille attendu avec une épaisseur high- $\kappa$  plus importante est donc à pondérer.
2. Alors qu'un mécanisme de conduction de type tunnel est à l'origine du courant

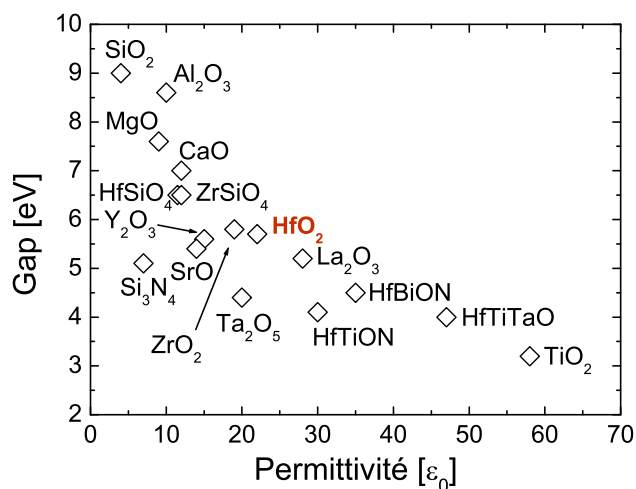


FIGURE 1.4 – Evolution de la largeur de bande interdite (gap) d’une sélection exhaustive de diélectriques high- $\kappa$  en fonction de leur permittivité (données issues de [14]).

de grille dans un empilement SiO<sub>2</sub> [7], des défauts structuraux en volume des diélectriques high- $\kappa$  sont susceptibles d’induire une composante additionnelle au courant de grille total (en plus de la composante tunnel), conduisant à un courant de grille plus important et activé en température [15, 16, 17].

- Enfin, la présence d’un oxyde d’interface SiO<sub>2</sub> ultra-mince et de faible permittivité tend à dégrader le compromis  $I_g$  vs EOT global de l’empilement.

La conduction électrique dans un empilement high- $\kappa$  à température ambiante a déjà fait l’objet d’études dans la littérature, mais aucun consensus sur les mécanismes de conduction et les paramètres du bi-couche oxyde d’interface - high- $\kappa$  ne semble se dégager.

En effet, de nombreux travaux attribuent la conduction électrique à un unique mécanisme tunnel [18, 19, 20, 21]. Les modèles de courant tunnel proposés sont certes capables de reproduire les caractéristiques expérimentales  $I_g(V_g)$  de divers empilements high- $\kappa$ , mais les paramètres de simulation (donnés comme étant les paramètres intrinsèques des matériaux) varient significativement d’une étude à l’autre [22]. Ces approches couplant simulation et expérience comportent en effet de nombreuses approximations simplificatrices, rendant suspectes les extractions de paramètres proposées :

- Certains modèles tunnels employés négligent les effets quantiques (confinement des porteurs dans le Silicium, réflexion des fonctions d’onde aux interfaces...) et décrivent donc le transport et la distribution de charge à l’interface du Silicium de manière incorrecte [23, 24, 25].
- La présence d’éventuels mécanismes de conduction assistés par pièges et par température n’est pas toujours prise en compte, ce qui peut conduire à une

---

extraction de paramètres erronée [26].

- L’oxyde d’interface est habituellement modélisé comme étant du  $\text{SiO}_2$  “pur”, alors que plusieurs études suggèrent qu’il peut soit présenter une sous - stœchiométrie [27], soit un comportement de type silicate [28].
- Enfin, des résultats de simulation atomistique remettent en doute l’approximation de la masse effective dans un matériau high- $\kappa$  et la nature abrupte des interfaces entre les matériaux [29, 30].

En conclusion, si la maîtrise de l’élaboration des couches diélectriques progresse, le développement des empilements high- $\kappa$  se heurte à un manque de compréhension des mécanismes physiques à l’origine du courant de grille, et à une faible connaissance des paramètres des matériaux  $\text{SiO}_2$  et high- $\kappa$  (permittivités, masses tunnel et hauteurs de barrière). L’optimisation du compromis  $I_g$  vs EOT reste donc empirique, et une étude de la conduction apparaît indispensable pour identifier les diélectriques high- $\kappa$  à même de remplacer le  $\text{HfO}_2$  et ses dérivés au-delà du nœud 32 nm.

Cette thèse se propose d’aboutir à une meilleure compréhension des mécanismes de conduction dans un empilement Silicium - oxyde d’interface - high- $\kappa$  - métal, en s’appuyant sur une étude expérimentale complète et rigoureuse permettant de limiter au maximum le nombre d’hypothèses simplificatrices. Cette démarche, qui fait aujourd’hui défaut à la littérature, s’articule autour des 2 axes suivants :

- la mise en œuvre d’un modèle de courant tunnel, adapté à l’étude du transport dans un empilement oxyde d’interface - high- $\kappa$  et prenant en compte les effets quantiques inhérents à l’épaisseur ultra-mince des couches étudiées,
- l’utilisation d’un ensemble complet d’empilements IL -  $\text{HfO}_2$  et de moyens de caractérisation avancés.

Le Chapitre 2 étudie l’effet quantique de confinement à l’interface Silicium - oxyde interfacial. La modélisation de ce phénomène est en effet nécessaire pour d’une part extraire les paramètres EOT et  $V_{\text{FB}}$  d’un empilement à partir de sa caractéristique  $C(V_g)$  expérimentale, et d’autre part modéliser la distribution de charge dans le Silicium. Pour les gammes d’EOT ultra-minces considérées au cours de cette thèse (proches de 1 nm), nous proposons un outil de simulation Poisson-Schrödinger adapté, prenant en compte la pénétration des fonctions d’onde des porteurs dans l’empilement, et incluant une description  $k \cdot p$   $6 \times 6$  de la bande de valence.

Le Chapitre 3 présente une étude complète de la conduction électrique dans différents empilements oxyde d’interface -  $\text{HfO}_2$  - grille métallique TiN. Dans ce chapitre, notre objectif est de proposer une méthodologie cohérente pour extraire les paramètres tunnel permettant de modéliser le courant de grille dans des empilements d’épaisseur variable. Pour garantir la précision de notre approche et limiter au maximum le nombre d’hypothèses simplificatrices, nous nous attacherons à discriminer les différents mécanismes de conduction en présence, notamment grâce à des mesures à basse température. Par ailleurs, des solutions originales pour modéliser le

transport tunnel sont également proposées.

L'étude du courant de grille dans des empilements high- $\kappa$  avec additifs Lanthane et Magnésium fait l'objet du Chapitre 4. L'introduction de ces additifs dans un empilement MOS vise à ajuster la tension de seuil des transistors, mais sont également susceptibles de modifier le courant de grille. Notre approche consistera donc à appliquer les méthodes de caractérisation précédemment proposées à l'étude d'empilements en cours de développement, et d'identifier l'origine physique du décalage de tension de seuil grâce à l'analyse de la conduction.

Enfin, le Chapitre 5 se propose d'ouvrir la voie vers une modélisation plus réaliste des empilements de grille, en prenant notamment en compte des interfaces graduelles entre les différents matériaux composant un empilement high- $\kappa$ . L'impact d'une telle description sur la modélisation du confinement quantique et la simulation du courant tunnel sera mesuré, tout en pondérant l'influence respective de chacune des 3 interfaces (Silicium - oxyde d'interface, oxyde d'interface - high- $\kappa$  et high- $\kappa$  - grille métallique).

## Bibliographie

- [1] J. Kilby, “Miniaturized Electronic Circuits,” American Patent #3,138,743, 1959. [3](#)
- [2] G. E. Moore, “Cramming more Components onto Integrated Circuits,” *Electronics*, vol. 38, no. 8, pp. 114 – 117, 1965. [3](#)
- [3] R. Dennard, F. Gaensslen, V. Rideout, E. Bassous, and A. LeBlanc, “Design of ion-implanted MOSFET’s with very small physical dimensions,” *IEEE Journal of Solid-State Circuits*, vol. 9, no. 5, pp. 256 – 268, 1974. [3](#), [4](#)
- [4] F. Boeuf and T. Skotnicki, *Physique des dispositifs pour circuits intégrés silicium*. Lavoisier, 2003, Chap. Introduction à la Physique du Transistor MOS. [4](#), [6](#)
- [5] International Technology Roadmap for Semiconductors, “Process Integration, Devices, and Structures,” 2001. Lien : <http://www.itrs.net/Links/2001ITRS/PIDS.pdf> [4](#)
- [6] S. Tyagi, M. Alavi, R. Bigwood, T. Bramblett, J. Brandenburg, W. Chen, B. Crew, M. Hussein, P. Jacob, C. Kenyon, C. Lo, B. McIntyre, Z. Ma, P. Moon, P. Nguyen, L. Rumaner, R. Schweinfurth, S. Sivakumar, M. Stettler, S. Thompson, B. Tufts, J. Xu, S. Yang, and M. Bohr, “A 130 nm generation logic technology featuring 70 nm transistors, dual Vt transistors and 6 layers of Cu interconnects,” *IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, 2000, pp. 567 –570. [4](#)
- [7] S.-H. Lo, D. A. Buchanan, Y. Taur, and W. Wang, “Quantum-Mechanical Modeling of Electron Tunneling Current from the Inversion Layer of Ultra-Thin-Oxide nMOSFET’s,” *IEEE Electron Device Letters*, vol. 18, no. 5, pp. 209–211, 1997. [5](#), [8](#)
- [8] T. Ghani, M. Armstrong, C. Auth, M. Bost, P. Charvat, G. Glass, T. Hoffmann, K. Johnson, C. Kenyon, J. Klaus, B. McIntyre, K. Mistry, A. Murthy, J. Sandford, M. Silberstein, S. Sivakumar, P. Smith, K. Zawadzki, S. Thompson, and M. Bohr, “A 90nm high volume manufacturing logic technology featuring novel 45nm gate length strained silicon CMOS transistors,” *IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, 2003, pp. 11.6.1 – 11.6.3. [6](#)
- [9] O. Weber, “Etude, fabrication et propriétés de transport de transistors CMOS associant un diélectrique de grille haute permittivité et un canal de conduction haute mobilité,” Thèse de Doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2005. [6](#)
- [10] X. Garros, “Caractérisation et Modélisation de l’Oxyde d’Hafnium comme Alternative à la Silice pour les Futures Technologies CMOS Submicroniques,” Thèse de Doctorat, Université de Provence - Aix-Marseille I, 2004. [7](#)



- [11] K. Mistry, C. Allen, C. Auth, B. Beattie, D. Bergstrom, M. Bost, M. Brazier, M. Buehler, A. Cappellani, R. Chau, C.-H. Choi, G. Ding, K. Fischer, T. Ghani, R. Grover, W. Han, D. Hanken, M. Hattendorf, J. He, J. Hicks, R. Huessner, D. Ingerly, P. Jain, R. James, L. Jong, S. Joshi, C. Kenyon, K. Kuhn, K. Lee, H. Liu, J. Maiz, B. McIntyre, P. Moon, J. Neirynck, S. Pae, C. Parker, D. Parsons, C. Prasad, L. Pipes, M. Prince, P. Ranade, T. Reynolds, J. Sandford, L. Shifren, J. Sebastian, J. Seiple, D. Simon, S. Sivakumar, P. Smith, C. Thomas, T. Troeger, P. Vandervoorn, S. Williams, and K. Zawadzki, "A 45nm Logic Technology with High-k+Metal Gate Transistors, Strained Silicon, 9 Cu Interconnect Layers, 193nm Dry Patterning, and 100pc Pb-free Packaging," *IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, 2007, pp. 247–250. [7](#)
- [12] P. Packan, S. Akbar, M. Armstrong, D. Bergstrom, M. Brazier, H. Deshpande, K. Dev, G. Ding, T. Ghani, O. Golonzka, W. Han, J. He, R. Heussner, R. James, J. Jopling, C. Kenyon, S.-H. Lee, M. Liu, S. Lodha, B. Mattis, A. Murthy, L. Neiberg, J. Neirynck, S. Pae, C. Parker, L. Pipes, J. Sebastian, J. Seiple, B. Sell, A. Sharma, S. Sivakumar, B. Song, A. St. Amour, K. Tone, T. Troeger, C. Weber, K. Zhang, Y. Luo, and S. Natarajan, "High performance 32nm logic technology featuring 2nd generation high-k + metal gate transistors," *IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, 2009, pp. 1 –4. [7](#)
- [13] B. Guillaumot, X. Garros, F. Lime, K. Oshima, B. Tavel, J. Chroboczek, P. Masson, R. Truche, A. Papon, F. Martin, J. Damlencourt, S. Maitrejean, M. Rivoire, C. Leroux, S. Cristoloveanu, G. Ghibaudo, J. Autran, T. Skotnicki, and S. Deleonibus, "75 nm damascene metal gate and high-k integration for advanced CMOS devices," *IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, 2002, pp. 355 – 358. [7](#)
- [14] J. Huang, D. Heh, P. Sivasubramani, P. Kirsch, G. Bersuker, D. Gilmer, M. Quevedo-Lopez, M. Hussain, P. Majhi, P. Lysaght, H. Park, N. Goel, C. Young, C. Park, C. Park, M. Cruz, V. Diaz, P. Hung, J. Price, H.-H. Tseng, and R. Jammy, "Gate first high-k/metal gate stacks with zero SiO<sub>x</sub> interface achieving EOT=0.59nm for 16nm application," *Proc. Symp. VLSI Technology*, 2009, pp. 34 –35. [8](#)
- [15] Z. Xu, M. Houssa, S. De Gendt, and M. Heyns, "Polarity effect on the temperature dependence of leakage current through HfO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub> gate dielectric stacks," *Applied Physics Letters*, vol. 80, no. 11, pp. 1975–1977, 2002. [8](#)
- [16] O. Blank, H. Reisinger, R. Stengl, M. Gutsche, F. Wiest, V. Capodieci, J. Schulze, and I. Eisele, "A model for multistep trap-assisted tunneling in thin high-k dielectrics," *Journal of Applied Physics*, vol. 97, no. 4, p. 044107, 2005. [8](#)
- [17] M. Houssa, M. Tuominen, M. Naili, V. Afanasev, A. Stesmans, S. Haukka, and M. M. Heyns, "Trap-assisted tunneling in high permittivity gate dielectric stacks," *Journal of Applied Physics*, vol. 87, no. 12, pp. 8615–8620, 2000. [8](#)

## Bibliographie

---

- [18] A. Toriumi, K. Kita, K. Tomida, Y. Zhao, J. Widiez, T. Nabatame, H. Ota, and M. Hirose, “Materials science-based device performance engineering for metal gate high-k cmos,” *IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, 2007, pp. 53–56. [8](#)
- [19] Y.-C. Yeo, T.-J. King, and C. Hu, “MOSFET gate leakage modeling and selection guide for alternative gate dielectrics based on leakage considerations,” *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 50, no. 4, pp. 1027–1035, 2003. [8](#)
- [20] B. Govoreanu, P. Blomme, K. Henson, J. V. Houdt, and K. D. Meyer, “An Effective Model for Analysing Tunneling Gate Leakage Currents Through Ultrathin Oxides and High-k Gate Stacks from Si Inversion Layers,” *Solid-State Electronics*, vol. 48, no. 4, pp. 617 – 625, 2004. [8](#)
- [21] F. Li, S. P. Mudanai, Y.-Y. Fan, L. F. Register, and S. K. Banerjee, “Physically Based Quantum-Mechanical Compact Model of MOS Devices Substrate-Injected Tunneling Current Through Ultrathin (EOT 1 nm) SiO<sub>2</sub> and High-k Gate Stacks,” *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 53, no. 5, pp. 1096–1106, 2006. [8](#)
- [22] J. Coignus, C. Leroux, R. Clerc, R. Truche, G. Ghibaudo, G. Reimbold, and F. Boulanger, “HfO<sub>2</sub>-based gate stacks transport mechanisms and parameter extraction,” *Solid-State Electronics*, vol. 54, no. 9, pp. 972 – 978, 2010. [8](#)
- [23] M. Specht, M. Stadele, and F. Hofmann, “Simulation of high-k tunnel barriers for nonvolatile floating gate memories,” *Proceeding of the 32nd European Solid-State Device Research Conference (ESSDERC)*, 2002, pp. 599 – 602. [8](#)
- [24] J. Buckley, B. De Salvo, G. Molas, M. Gely, and S. Deleonibus, “Experimental and theoretical study of layered tunnel barriers for nonvolatile memories,” *Proceeding of the 35th European Solid-State Device Research Conference (ESSDERC)*, 2005, pp. 509–512. [8](#)
- [25] I. Mondal and A. Dutta, “An Analytical Gate Tunneling Current Model for MOSFETs Having Ultrathin Gate Oxides,” *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 55, no. 7, pp. 1682 –1692, 2008. [8](#)
- [26] S. Monaghan, P. K. Hurley, K. Cherkaoui, M. A. Negara, and A. S. Tyn dall, “Determination of physical parameters for HfO<sub>2</sub>/SiO<sub>x</sub>/TiN MOSFET gate stacks by electrical characterization and reverse modeling,” *Proc. 9th Int. Conf. Ultimate Integration of Silicon ULIS 2008*, 2008, pp. 107–110. [9](#)
- [27] J. F. Damlencourt, O. Renault, D. Samour, A. M. Papon, C. Leroux, F. Martin, S. Marthon, M. N. Séméria, and X. Garros, “Electrical and Physico-Chemical Characterization of HfO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub> Gate Oxide Stacks Prepared by Atomic Layer Deposition,” *Solid-State Electronics*, vol. 47, no. 10, pp. 1613 – 1616, 2003. [9](#)

- [28] P. D. Kirsch, P. Sivasubramani, J. Huang, C. D. Young, M. A. Quevedo-Lopez, H. C. Wen, H. Alshareef, K. Choi, C. S. Park, K. Freeman, M. M. Hussain, G. Bersuker, H. R. Harris, P. Majhi, R. Choi, P. Lysaght, B. H. Lee, H.-H. Tseng, R. Jammy, T. S. Boscke, D. J. Lichtenwalner, J. S. Jur, and A. I. Kingon, “Dipole model explaining high-k/metal gate field effect transistor threshold voltage tuning,” *Applied Physics Letters*, vol. 92, no. 9, p. 092901, 2008. [9](#)
- [29] F. Sacconi, J. Jancu, M. Povolotskyi, and A. Di Carlo, “Full-Band Tunneling in High-k Oxide MOS Structures,” *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 54, no. 12, pp. 3168–3176, dec. 2007. [9](#)
- [30] S. Markov, P. V. Sushko, S. Roy, C. Fiegna, E. Sangiorgi, A. L. Shluger, and A. Asenov, “Si-SiO<sub>2</sub> Interface Band-gap Transition Effects on MOS Inversion Layer,” *Physica Status Solidi (a)*, vol. 205, pp. 1290–1295, 2008. [9](#)





# Modélisation de l'effet de champ

---

Au cours du chapitre précédent, nous avons introduit la nécessaire réduction d'échelle des composants MOS pour accroître leur gain tant en performance qu'en densité d'intégration.

Les grandeurs caractéristiques de ces composants, et plus particulièrement l'épaisseur d'oxyde(s) de grille, atteignent aujourd'hui une échelle nanométrique : il devient nécessaire de prendre en compte les effets quantiques pour toute modélisation précise de ces structures, la physique dite "classique" n'étant plus à même de rendre compte de leur comportement électrique.

Dans un empilement métal - oxyde - semiconducteur (MOS), l'effet de champ exercé par la grille sur le substrat Silicium modifie la courbure de bandes à l'interface et y confine un gaz de porteurs dans un plan bidimensionnel (2D). La modélisation de ce confinement fait intervenir le comportement électrostatique des porteurs, régi par l'équation de Poisson, avec leur nature quantique, décrite par l'équation de Schrödinger.

La résolution couplée de ces deux équations permet de calculer les profils de potentiel et de charge dans la structure simulée pour différentes polarisations de grille  $V_g$ . Cette simulation est doublement importante dans le cadre de ces travaux de thèse :

- Confrontée à la relation  $C(V_g)$  expérimentale d'un empilement MOS donné, elle permet d'extraire l'EOT, le niveau de dopage (Na ou Nd selon qu'on considère un substrat p ou n) et la tension de bandes plates  $V_{FB}$ . Ces données sont de première importance pour une connaissance accrue de l'empilement, et pour une modélisation fine du courant de grille.
- Elle permet une description précise de la distribution énergétique des charges situées à l'interface du substrat Silicium et susceptibles de transiter dans l'empilement de grille, une donnée nécessaire pour la modélisation du transport transverse.

La section 1 introduit tout d'abord le principe de la simulation auto-cohérente Poisson-Schrödinger. Puis, après un état de l'art détaillé jalonnant l'évolution de cette simulation ces 30 dernières années, notre contribution et les innovations apportées seront résumées dans la section 2.

Les principes physiques régissant l'auto-cohérence Poisson-Schrödinger sont ensuite détaillés dans la section 3. La résolution des équations de Poisson et de Schrödinger dans une structure MOS sous champ électrique y est notamment abordée.

La difficulté de la modélisation de l'effet de champ repose essentiellement dans

son intégration au sein d'un simulateur numérique : les enjeux de cette intégration et l'optimisation entre précision souhaitée et temps de calcul sont abordés dans la section 4.

Enfin, la section 5 présente les résultats de simulation obtenus dans le cadre de cette étude et souligne la pertinence des innovations apportées en s'appuyant sur des données expérimentales.

A noter que l'Annexe A définit et introduit un certain nombre de notions de physique des dispositifs semi-conducteurs utiles à la compréhension de ce chapitre. Elle complète plus particulièrement la section 3.

### 1 Principe de la simulation Poisson-Schrödinger

L'axe  $z$  dénotera tout au long de ce chapitre la direction du confinement.

En introduction, nous avons mentionné le caractère à la fois électrostatique et quantique du comportement des porteurs à l'interface oxyde - substrat Silicium. Une résolution auto-cohérente est nécessaire pour aboutir à un profil de potentiel  $V(z)$  dans la structure simulée qui réponde à la fois aux exigences des équations de Poisson et Schrödinger :

- L'équation de Schrödinger donne, entre autres, la concentration volumique de charge  $\rho_{\text{tot}}(z)$  ( $\text{C.m}^{-3}$ ) dans le substrat à partir de l'énergie potentielle  $E_{\text{pot}}(z)$ <sup>1</sup> (eV) de la structure. La Figure 2.1 montre ainsi le profil de charge calculé par l'équation de Schrödinger en fonction d'un profil d'énergie potentielle donné.
- Inversement, l'équation de Poisson donne le potentiel  $V(z)$  à partir d'une certaine concentration de charge  $\rho_{\text{tot}}(z)$ .

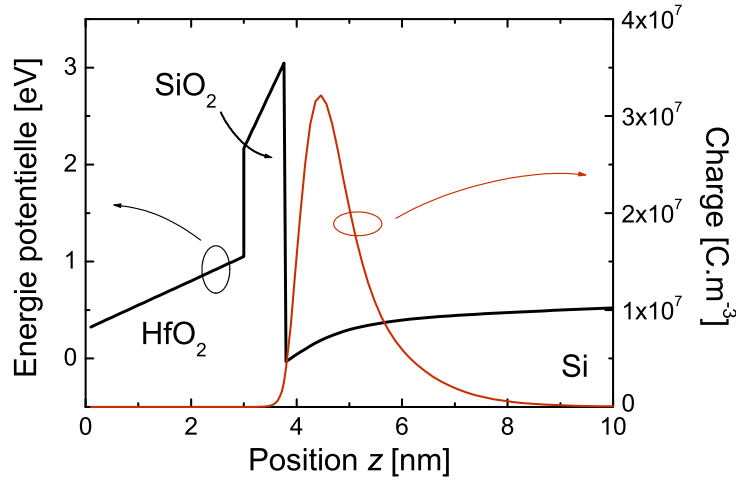


FIGURE 2.1 – Concentration de charge et énergie potentielle dans une structure nMOS 3nm HfO<sub>2</sub> - 0.8nm SiO<sub>2</sub> sous polarisation  $V_g = 3\text{V}$  et pour un dopage  $N_a = 3.10^{23} \text{ m}^{-3}$ .

Le potentiel solution  $V(z)$  s'obtient en résolvant de manière itérative ces deux équations : une boucle de convergence est nécessaire (schématisée Figure 2.2) et un nombre fini d'itérations permet d'obtenir le profil de potentiel recherché.

Une fois l'auto-cohérence atteinte pour chaque point de polarisation, l'ensemble des caractéristiques électriques relatives à l'effet de champ peuvent être déduites,

1. L'énergie potentielle est simplement liée au potentiel électrostatique par la relation  $E_{\text{pot}}(z) = -V(z) + \Delta E_C(z)$ , avec  $\Delta E_C(z)$  la bande de conduction des différents matériaux de l'empilement considéré.



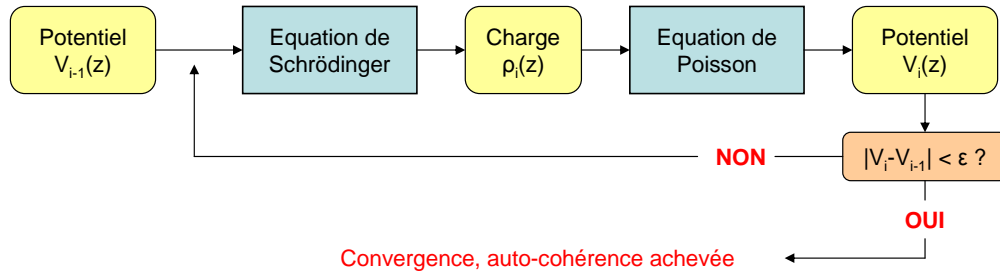


FIGURE 2.2 – Schéma de principe de la  $i^{\text{ème}}$  boucle de convergence d'une simulation Poisson-Schrödinger.

notamment la concentration totale de charge  $\rho_{\text{tot}}(z)$  dans le substrat, la charge totale en fonction du potentiel de surface ou de grille ( $Q_{\text{sc}}(V_s)$  et  $Q_{\text{sc}}(V_g)$ ) et la relation  $C(V_g)$ .

## 2 Etat de l'art

### 2.1 Historique

Dès 1970, Stern et Howard introduisent la simulation numérique Poisson - Schrödinger appliquée à l'étude de structures MOS [1, 2]. Les bases de la simulation auto-cohérente y sont posées, ainsi que diverses approximations analytiques, les moyens informatiques, à l'époque limités, ne permettant que difficilement la résolution numérique "exacte". Ces études restent cantonnées à la simulation de l'effet de champ dans le substrat (diélectrique SiO<sub>2</sub> non simulé), et en condition d'inversion électronique (cas nMOS).

Les effets quantiques dans une structure MOS induisent un décalage du barycentre de charges à l'interface du substrat, comme on peut le constater sur la Figure 2.1. La zone désertée entre l'interface et le pic de charge est appelée *darkspace*. De l'ordre du nanomètre, la modélisation de cet effet n'était pas de première importance dans les années 1970, les dispositifs les plus avancés présentant des épaisseurs de SiO<sub>2</sub> de grille de plusieurs dizaines de nanomètres.

La simulation Poisson-Schrödinger s'est rendue indispensable à la fin des années 1980, une fois l'épaisseur d'oxyde en-dessous des 10 nanomètres et le darkspace non négligeable. Modélisant désormais les électrons et les trous [3], elle permet théoriquement de s'affranchir de l'approximation de la désertion totale<sup>2</sup> grâce à la simulation conjointe des porteurs majoritaires et minoritaires au sein d'une même structure [4]. Simuler toute la zone de désertion (pouvant s'étendre jusqu'à 1  $\mu$ m pour les dopages les plus faibles) augmente néanmoins considérablement le temps de calcul par rapport à la simulation de la zone "quantique" proche de l'interface. Il faut attendre la fin des années 1990 et les travaux de A. Spinelli et A. Pacelli pour voir des simulations auto-cohérentes de la zone de désertion utilisant une méthode quantique proche de l'interface et une approche classique pour le reste de la zone simulée [5, 6].

Il est important ici d'insister sur le rôle d'accompagnement et de support à la caractérisation électrique de la simulation Poisson-Schrödinger. Les années 1990 ont ainsi vu la communauté scientifique se pencher plus particulièrement sur la modélisation quantique du régime d'accumulation et de la transition accumulation - désertion au voisinage de la tension de bandes plates  $V_{FB}$  [7, 8, 9]. En régime d'inversion et de forte accumulation, toute la charge est située sur les niveaux quantifiés et donc décrite par un unique traitement quantique 2D. Au voisinage de  $V_{FB}$ , vu la faible courbure de bandes, la prise en compte des charges 3D non-confinées est nécessaire, comme indiqué Figure 2.3. Les effets quantiques seront tout d'abord pris en compte grâce à un "découpage" 2D+3D [8, 9], puis un traitement quantique unique sera considéré comme pertinent pour décrire à la fois la transition 2D  $\rightarrow$  3D et le

---

2. En régime de désertion, la charge des dopants n'est plus compensée par les majoritaires dans une zone  $t_{dep}$  s'étendant dans le substrat. Dans l'approximation de la désertion totale,  $t_{dep}$  a un profil abrupt et la charge associée est simplement donnée par  $Q_{dep} = -e Na t_{dep}$  avec  $Na$  la concentration volumique de dopants.

continuum (ou plutôt quasi-continuum) de charges pour des énergies supérieures à la profondeur du puits [6, 10]. Dans ce dernier cas, une boîte quantique de 20-30nm est jugée suffisante pour rendre compte d'un niveau de charge 3D avec une approche 2D.

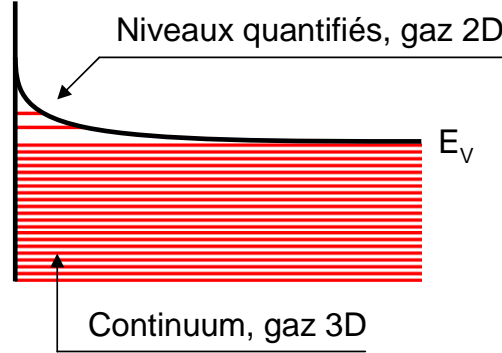


FIGURE 2.3 – Représentation schématique de la répartition des charges en régime de faible accumulation nMOS, au voisinage de la tension de bandes plates  $V_{FB}$ .

La modélisation de la pénétration des fonctions d'onde dans le(s) diélectrique(s) de grille va également s'avérer de première importance dès le début des années 2000. Bien que ponctuellement considérée dans certains travaux publiés antérieurement, l'influence de la prise en compte de ce phénomène est jugée importante dès lors que l'épaisseur du diélectrique de grille devient inférieure à 2nm : en effet, la part évanescence des fonctions d'onde induit une probabilité de présence non-nulle de charges dans l'oxyde interfacial<sup>3</sup>. De l'ordre de quelques angströms, cette pénétration n'est plus négligeable et la résolution auto-cohérente doit inclure le ou les diélectriques de grille dans la structure simulée [11, 12, 13]. La Figure 2.4 illustre ce phénomène.

La simulation Poisson-Schrödinger, comparée à une caractéristique  $C(V_g)$  expérimentale, permet également l'extraction de la tension de bandes plates  $V_{FB}$ . Cette extraction, et donc sa modélisation, est importante pour toute étude relative au travail de sortie du métal de grille ou à la quantité de charges fixes indésirables présentes dans l'empilement. L'intérêt d'une définition précise de  $V_{FB}$  s'est accru avec l'introduction de matériaux high- $\kappa$ , susceptibles de présenter des charges fixes en volume ou de créer un dipôle à l'interface high- $\kappa$  - oxyde interfacial [14].

En 1999, Pacelli et al. [6] soulignent l'importance des effets quantiques en condition de bandes plates, c'est-à-dire sans confinement. Dans une approche classique, la charge des porteurs majoritaires est compensée par la charge des dopants en tout point du substrat et  $V(z) = \text{cte} = 0 \text{ eV}$ . Dans une approche quantique, l'annulation des fonctions d'onde des porteurs majoritaires au voisinage de l'interface y induit

3. Ce phénomène est à l'origine du courant tunnel.

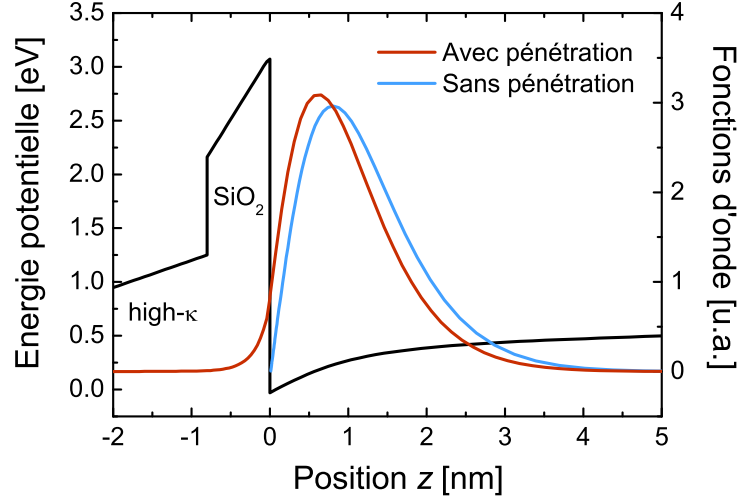


FIGURE 2.4 – Fonctions d’onde du premier niveau quantifié des électrons L obtenues au cours de simulations incluant ou non les diélectriques de grille dans les structures simulées.

un déficit de charge : une légère courbure de bandes est alors présente à  $V_g = V_{FB}$  pour garantir la neutralité électrique  $Q(V_{FB}) = 0$ . Pacelli et al. insistent alors sur l’importance de ce déficit, d’autant plus important que le dopage est élevé, pour la simulation de grilles Polysilicium fortement dopées. Malgré l’introduction de grilles métalliques, les valeurs de dopage utilisées aujourd’hui pour le substrat Silicium et la précision d’extraction de  $V_{FB}$  requise imposent la prise en compte de ce phénomène.

Il est également intéressant de relever que l’ensemble des travaux sur le confinement présent dans la littérature (pour étude de l’empilement de grille) approxime les bandes de conduction et de valence du Silicium comme paraboliques. Néanmoins, des simulations avancées ont montré que cette approximation n’est valable que dans une gamme d’une centaine de meV [15]. En régimes d’accumulation ou d’inversion, les porteurs confinés dans un gaz 2D atteignent des énergies supérieures et cette description peut être remise au cause. Une description des bandes de conduction et de valence dans une large gamme énergétique est également nécessaire pour l’étude du transport dans le Silicium contraint [16], pour des gaz 2D comme 3D.

Parmi les différentes approches permettant le calcul de structure de bande (méthode des liaisons fortes, pseudo-potentiel, ab initio...), la méthode  $k \cdot p$  est une résolution de l’équation de Schrödinger s’apparentant à un développement limité de la structure de bandes autour du centre de la zone de Brillouin. On distingue ainsi des simulations  $k \cdot p$  prenant en compte plus ou moins de bandes, pour une description plus ou moins complète des bandes de conduction ou de valence. Les bases de cette théorie ont été posées dès les années 50 par Luttinger [17, 18] puis affinées par Kane [19].

Dans le cadre de l’étude du confinement dans le Silicium, Van Der Steen et al. ont

validé l'approche parabolique pour la bande de conduction [20]. Le cas de la bande de valence est plus litigieux : l'approximation parabolique est remise en question dans les années 90 [21] en comparant sa structure de bandes avec celle obtenue dans l'approche  $k \cdot p$   $6 \times 6$ , puis dans le cadre de l'étude de la mobilité des trous dans le Silicium contraint présentant différentes orientations [22]. A noter qu'une description avancée de la bande de valence du Silicium non-contraint n'a jamais été considérée dans un simulateur Poisson-Schrödinger pour l'étude du confinement et l'extraction de paramètres à partir de relations expérimentales  $C(V_g)$ .

### 2.2 Description du simulateur développé

Une connaissance accrue des empilements caractérisés (notamment de leur EOT) et la nécessité d'une description précise des charges confinées à l'interface justifient le développement d'un simulateur Poisson-Schrödinger au cours de cette thèse. Les principales caractéristiques du simulateur et les hypothèses considérées sont décrites ci-dessous :

1. La structure simulée est unidimensionnelle (1D) dans le sens du confinement et consiste en un diélectrique high- $\kappa$ , un oxyde interfacial  $\text{SiO}_2$  et le substrat Silicium. L'étude expérimentale d'un empilement de grille étant en général réalisée sur des surfaces de grille importantes (de  $10 \times 10 \mu\text{m}^2$  à  $100 \times 100 \mu\text{m}^2$  dans notre cas), les effets de bord 2D ont été négligés [23]. De plus, l'inclusion des diélectriques dans la structure simulée permet de prendre en compte la pénétration des fonctions d'onde dans la grille.
2. La prise en compte conjointe des trous et des électrons dans la résolution auto-cohérente permet de simuler le comportement des porteurs pour toute courbure de bande, et ainsi traiter les régimes d'inversion, de désertion et d'accumulation sans distinction aucune. Pour chaque polarisation, l'auto-cohérence converge vers les profils de charge (en  $\text{C.m}^{-3}$ ) suivants :
  - $\rho_e(z) = \rho_{eL}(z) + \rho_{eT}(z)$  pour les électrons des vallées L et T respectivement,
  - $\rho_h(z) = \rho_{hHH}(z) + \rho_{hLH}(z)$  pour les trous lourds (HH) et légers (LH) respectivement si la bande de valence est approximée par une relation de dispersion parabolique,
  - $\rho_h(z) = \rho_{hHH}(z) + \rho_{hLH}(z) + \rho_{hSO}(z)$  pour les trous lourds (HH), légers (LH) et split-off (SO) respectivement si la bande de valence est décrite par une approche avancée  $k \cdot p$   $6 \times 6$  (cf. point 4 de ce paragraphe),
  - $\rho_{\text{dopants}}(z) = \text{cte}$  pour les dopants ionisés, en considérant un dopage constant dans le substrat.
3. En fonction du niveau de dopage, l'étendue de Silicium simulée est ajustée pour prendre en compte la totalité de la zone de désertion et ainsi s'affranchir de l'approximation de la désertion totale. Par exemple, pour un substrat p, la zone de Silicium simulée avec  $N_a = 2 \cdot 10^{23} \text{ m}^{-3}$  sera de 200 nm, alors qu'un dopage  $N_a = 1 \cdot 10^{20} \text{ m}^{-3}$  nécessite de simuler 10 000 nm de Silicium.

## 2. Etat de l'art

La Figure 2.5 compare à un potentiel donné la charge de désertion calculée dans l'approximation de la désertion totale à celle obtenue en résolvant l'auto-cohérence dans une zone étendue et en considérant l'ensemble des porteurs.

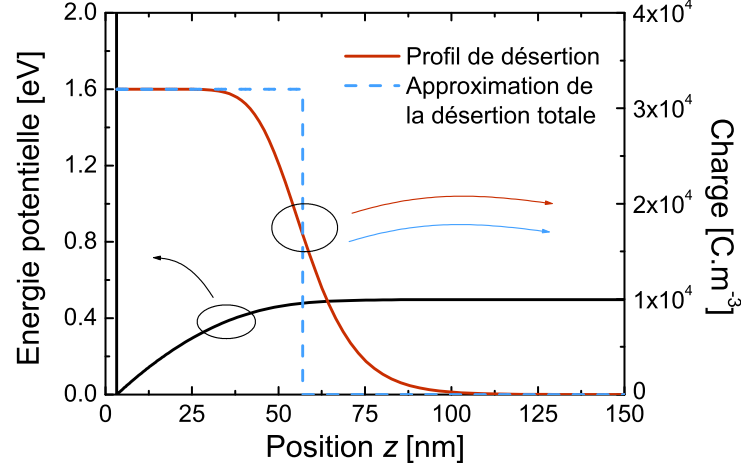


FIGURE 2.5 – Profil de charge en désertion et approximation de la désertion totale dans une structure nMOS pour une polarisation  $V_s = 0,5 \text{ eV}$  et un dopage  $N_a = 2 \cdot 10^{23} \text{ m}^{-3}$ .

Dans l'approximation de la désertion totale, la valeur de la charge en régime de désertion est analytique. Comparée avec notre approche, les résultats sont similaires, signe de la validité de cette approximation (voir Figure 2.6). Néanmoins, proche du régime de bandes plates, le modèle analytique diffère fortement de la charge de désertion réelle, comme le montre le tracé de l'erreur relative (Figure 2.6).

4. L'équation de Schrödinger est résolue dans chacun des matériaux selon l'approche de la masse effective (c'est à dire en considérant une approximation parabolique des structures de bande). Dans le cas de la bande de valence, une description plus complète (issue de simulations  $k \cdot p$   $6 \times 6$ ) est néanmoins proposée en parallèle de l'approximation parabolique. Une comparaison de ces 2 approches et leur influence sur l'extraction d'EOT sont proposées dans le paragraphe 3.2.3 de ce chapitre.
5. Les conditions limites en  $z = -t_{\text{SiO}_2} - t_{\text{HfO}_2}$  (interface métal - high- $\kappa$ ) et  $z = L_{\text{max}}$  (en profondeur du substrat) sont considérées fermées : le transport de charge aux extrémités de la structure 1D n'est pas pris en compte (annulation des fonctions d'onde) et la charge simulée est considérée comme stationnaire.

La seule prise en compte de la pénétration des fonctions d'onde dans les diélectriques de grille permet en effet de simuler la condition d'équilibre thermo-

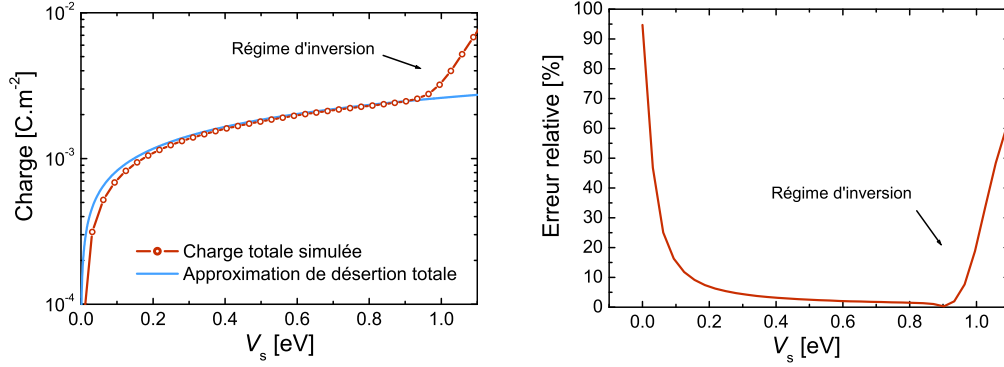


FIGURE 2.6 – Charge totale en fonction du potentiel de surface  $V_s$  comparée à l'approximation analytique de la désertion totale  $Q_{\text{dep}} = \sqrt{2eNa\epsilon_{\text{Si}}} V_s$ , également représenté en erreur relative (structure nMOS, dopage  $Na = 2 \cdot 10^{23} \text{ m}^{-3}$ ).

dynamique dans le canal, où les pertes par effet tunnel sont compensées par des sources infinies de porteurs, source-drain pour les minoritaires, substrat pour les majoritaires. Cela permet de s'affranchir d'une simulation 2D de tout le transistor MOS [24].

La perte de charges dans le métal est considérée négligeable et ne rompant pas l'équilibre : Palestri et al. [25] ont comparé différents simulateurs Poisson-Schrödinger, prenant tous en compte la pénétration des fonctions d'onde, et différant par la nature de leurs conditions limites dans la grille. Des résultats très similaires montrent la pertinence de la simulation 1D avec conditions limites fermées.

## 3 Modélisation du confinement quantique

Nous résumons dans ce paragraphe les principes physiques qui gouvernent la résolution auto-cohérente Poisson-Schrödinger : les équations de Poisson et Schrödinger sont présentées et la description avancée de la bande de valence du Silicium introduite.

### 3.1 L'équation de Poisson

La formulation générale de l'équation de Poisson liant profil de potentiel  $V(z)$  et profil de charge  $\rho_{\text{tot}}(z)$  dans un milieu non-homogène est :

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \varepsilon(z) \frac{\partial V(z)}{\partial z} \right) = -\rho_{\text{tot}}(z), \quad (2.1)$$

avec  $\varepsilon(z)$  la dépendance spatiale de la permittivité électrique et :

$$\begin{aligned} \rho_{\text{tot}}(z) &= \sum_{\nu} \rho_{\nu}(z) - e \text{Na} \\ &= -e [n(z) - p(z) + \text{Na}], \end{aligned} \quad (2.2)$$

en considérant l'exemple d'une structure nMOS (substrat p).  $e$  est la charge élémentaire,  $n(z)$  et  $p(z)$  les concentrations volumiques d'électrons et de trous et Na la concentration d'espèces dopantes.

### 3.2 L'équation de Schrödinger

#### 3.2.1 Formulation générale

Nous considérons l'ensemble des systèmes modélisés à l'équilibre et indépendants du temps (c'est-à-dire stationnaires), comme discuté précédemment dans le paragraphe 2.2. La formulation générale de l'équation de Schrödinger indépendante du temps est donnée par :

$$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle, \quad (2.3)$$

avec  $H$  l'opérateur Hamiltonien, assimilable dans un système stationnaire à l'opérateur énergie totale. Il contient l'ensemble des informations nécessaires pour caractériser le système étudié (notamment l'énergie potentielle dans la structure  $E_{\text{pot}}$ ), et ainsi calculer les gammes d'énergie accessibles aux porteurs.

Les valeurs propres  $E_n$ , solutions de l'Equation 2.3, peuvent soit correspondre à un ensemble discret de valeurs (on parle d'énergie quantifiée, par exemple dans le cas de particules confinées), soit à un spectre continu, également appelé continuum énergétique dans le cas de particules libres. A chaque  $E_n$  correspond un (ou plusieurs



en cas de dégénérescence) état propre  $|\psi_n\rangle$ , fonction d'onde dont le module carré donne la densité de probabilité de présence d'une particule ayant une énergie  $E_n$ .

Dans un cristal à l'équilibre (non soumis à un champ électrique), l'opérateur Hamiltonien s'exprime par :

$$H = \left[ \frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V_c(\vec{r}) \right] \quad (2.4)$$

avec  $\vec{p} = \hbar\vec{k} = -i\hbar\vec{\nabla}$  l'opérateur quantité de mouvement,  $m_0$  la masse de l'électron libre,  $V_c(\vec{r})$  le potentiel cristallin créé par les atomes du réseau (périodique) et  $\vec{r}$  le vecteur position. Dans le vide ( $V_c(\vec{r}) = 0$ ), les solutions de l'équation de Schrödinger sont des ondes planes  $\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ . Dans un cristal ( $V_c(\vec{r}) \neq 0$ ), les solutions sont de la forme [26] :

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.5)$$

avec  $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$  les fonctions de Bloch (périodiques suivant le réseau cristallin). A partir des Equations 2.3 et 2.4, l'équation aux valeurs propres suivante donne les fonctions de Bloch solutions (équation à résoudre pour chaque valeur prise par  $\vec{k}$ ) [15] :

$$\left[ \frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V_c(\vec{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k}\cdot\vec{p} \right] u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \left( E_n(\vec{k}) - \frac{\hbar^2 |\vec{k}|^2}{2m_0} \right) u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.6)$$

Cette équation générale (et exacte) donne la structure de bandes  $E_n(\vec{k})$  du matériau mais sa résolution est impossible. Néanmoins, considérer le terme  $\vec{k}\cdot\vec{p}$  comme négligeable au voisinage de  $\vec{k} = \vec{0}$  permet d'appliquer la théorie des perturbations et simplifie le calcul numérique de la structure de bande (cette méthode est appelée méthode  $k \cdot p$ , largement décrite dans les ouvrages de référence [15, 27, 28]). L'ordre choisi pour le développement limité de  $\vec{k}\cdot\vec{p}$  au voisinage de 0 conditionnera la validité de la relation de dispersion obtenue dans une plus ou moins grande gamme d'énergie.

### 3.2.2 Relation de dispersion d'une structure confinée

Dans une structure MOS soumise à un champ électrique et créant un confinement suivant  $z$ , l'énergie totale d'un porteur d'une sous-bande  $n$  (famille de porteurs  $\nu$ <sup>4</sup>) s'écrit :

$$E_{n,\nu} = \varepsilon_{n,\nu} + E_{\nu,\parallel}(\vec{k}_{\parallel}), \quad (2.7)$$

avec  $\varepsilon_{n,\nu}$  l'énergie associée au confinement dans la direction  $z$  et  $E_{\nu,\parallel}(\vec{k}_{\parallel})$  le continuum d'énergie suivant  $\vec{k}_{\parallel}$ , composante de  $\vec{k}$  dans le plan parallèle à l'interface<sup>5</sup>.

4. Les familles de porteurs considérées, comme indiqué page 24, sont les électrons L et T, et les trous HH, LH et éventuellement SO en fonction de l'approche retenue.

5. Le mouvement des porteurs reste en effet libre dans les directions  $x$  et  $y$  au sein d'une couche d'inversion ou d'accumulation.

### 3. Modélisation du confinement quantique

Pour la modélisation du transport suivant  $z$  (courant de grille), seule la contribution à l'énergie cinétique dans cette même direction ( $\varepsilon_{n,\nu}$ ) est considérée. Néanmoins, la modélisation de la relation  $E_{\nu,\parallel}(\vec{k}_{\parallel})$  d'une famille  $\nu$  reste indispensable car permettant le calcul de la densité d'état bidimensionnelle (DOS 2D). En écrivant  $\vec{k}_{\parallel}$  non pas en coordonnées cartésiennes ( $\vec{k}_{\parallel} = \vec{k}_x + \vec{k}_y$ ), mais polaires (paramètres  $|\vec{k}_{\parallel}|$ <sup>6</sup> et  $\theta$ ), la DOS 2D est donnée par [29] :

$$\text{DOS}(E) = \sum_{n,\nu} U(E - \varepsilon_{n,\nu}) D_{\nu}(E - \varepsilon_{n,\nu}) \quad (2.8)$$

avec  $D_{\nu}(E_{\parallel}) = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{2\pi} k_{\parallel}(E_{\parallel}, \theta) \frac{\partial k_{\parallel}(E_{\parallel}, \theta)}{\partial E_{\parallel}} d\theta$

et  $U(x)$  la fonction de Heavyside.

#### 3.2.3 Application à la modélisation de la bande de valence

Négliger le terme  $\vec{k} \cdot \vec{p}$  dans l'Equation 2.6 revient à négliger les interactions entre les différentes bandes d'énergie. Cette approximation est valable pour un gaz 2D d'électrons de la bande de conduction du Silicium [20] : le gap étant indirect, 6 vallées dans 6 directions cristallines différentes portent la charge électronique. Décentrées de  $\vec{k} = \vec{0}$ , il est raisonnable de considérer que les 6 bandes afférentes n'interagissent pas entre elles.

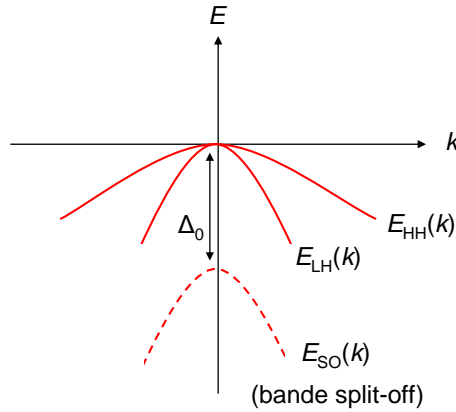


FIGURE 2.7 – Schéma simplifié de la structure de bande de valence du Silicium. La bande split-off est décalée des bandes de trous lourds et légers d'une valeur  $\Delta_0 = 44\text{meV}$  et ne sera prise en compte que dans l'approche  $k \cdot p$ .

Les bandes de trous lourds HH et légers LH de la bande de valence du Silicium sont toutes deux centrées en  $\vec{k} = \vec{0}$ , comme schématisé Figure 2.7. Dans ce cas, deux approches peuvent être retenues pour la résolution de l'équation de Schrödinger :

6. Pour des raisons de lisibilité, la norme du vecteur  $\vec{k}_{\parallel}$  sera simplement notée  $k_{\parallel}$

1. l'approximation de la masse effective, consistant à résoudre l'Equation 2.6 en  $\vec{k} = \vec{0}$  (négligeant donc les interactions entre la bande HH et la bande LH), et en considérant une relation de dispersion  $E_{\nu,\parallel}(\vec{k}_{\parallel})$  parabolique pour le calcul de la DOS 2D,
2. la méthode  $k \cdot p$  prenant en compte les interactions entre HH et LH et intégrant une troisième bande SO (Split-Off, due à l'interaction spin orbite). Cette méthode considérant 3 bandes ainsi que le spin de l'électron pour chacune d'entre elles ( $\times 2$ ), nous parlerons de méthode  $k \cdot p$   $6 \times 6$ .

### Approximation de la masse effective

Sous champ électrique dans la direction  $z$ , les solutions de l'équation de Schrödinger (Equation 2.3) ont la forme suivante [27] :

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \varphi_n(z) \quad (2.9)$$

avec  $\varphi_n(z)$  la fonction enveloppe<sup>7</sup> obtenue en  $k_{\parallel} = 0$ . Pour chaque famille de sous-bandes  $\nu$ , elle s'obtient en résolvant l'équation unidimensionnelle :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{\nu}} \frac{\partial^2 \varphi_{n,\nu}(z)}{\partial z^2} + E_{\text{pot}}(z) \varphi_{n,\nu}(z) = \varepsilon_{n,\nu} \varphi_{n,\nu}(z), \quad (2.10)$$

avec  $m_{\nu}$  la masse effective de la bande considérée :  $m_{\text{HH}} = 0,49m_0$  et  $m_{\text{LH}} = 0,19m_0$ . La résolution de cette équation dans une structure d'énergie potentielle  $E_{\text{pot}}(z)$  permet donc d'obtenir l'énergie  $\varepsilon_{n,\nu}$ , la densité de probabilité de présence  $|\varphi_{\nu,n}|^2$  de chaque sous-bande  $n$  et donc la concentration totale de charge pour chaque famille de porteurs  $\rho_{\nu}(z)$ .

Dans l'approximation de la masse effective appliquée à la bande de valence, la relation de dispersion  $E_{\nu,\parallel}(\vec{k}_{\parallel})$  est parabolique et invariante par rotation  $\theta$  :

$$E_{\nu,\parallel}(\vec{k}_{\parallel}) = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{\nu}} \quad (2.11)$$

Pour chaque sous-bande, la résolution de l'Equation 2.8 donne une DOS constante :

$$D_{\nu}(E_{\parallel}) = \frac{m_{\nu}}{\pi \hbar^2} \quad (2.12)$$

Intégrer une telle approche dans un simulateur Poisson-Schrödinger est peu coûteux en temps de calcul : le calcul des valeurs propres  $\varepsilon_{n,\nu}$  et vecteurs propres  $\varphi_{n,\nu}(z)$  de l'Equation 2.11 consiste en la diagonalisation de 2 matrices  $N \times N$  (une résolution HH et une résolution LH, calculées séparément), avec  $N$  le maillage spatial de la structure suivant  $z$ <sup>8</sup>.

---

7. On parle ainsi d'approximation de la fonction enveloppe.

8. On notera que le temps de calcul numérique pour diagonaliser une matrice  $N \times N$  est proportionnel à  $N^2$ .

### 3. Modélisation du confinement quantique

#### Méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ $6 \times 6$

Le centrage des bandes HH et LH en  $\vec{k} = \vec{0}$  induit une dégénérescence des porteurs, et une anisotropie et non-parabolicité de la relation de dispersion dans le plan parallèle. La prise en compte de cette anisotropie nécessite de résoudre l'Equation 2.6 pour différentes valeurs de  $\vec{k}_{\parallel}$  pour pouvoir calculer la densité d'états. La Figure 2.8 montre la relation de dispersion HH calculée par la méthode  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  en regard d'une approche parabolique isotrope.

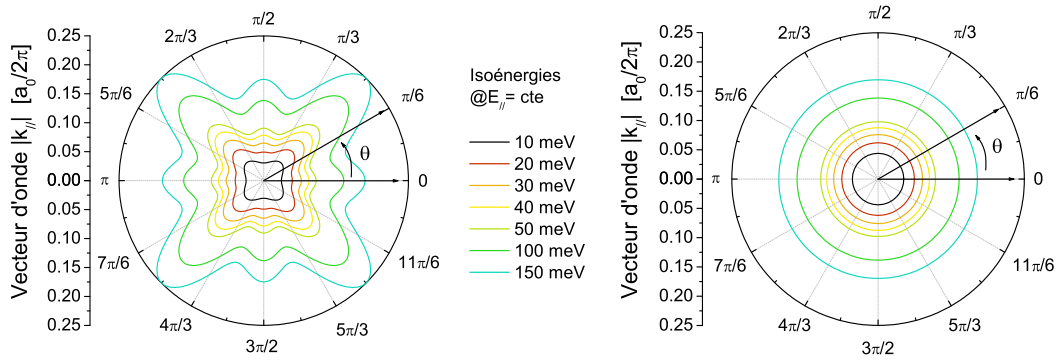


FIGURE 2.8 – Surfaces isoénergétiques ( $E_{\parallel} = \text{cte}$ ) dans le plan  $\langle xy \rangle$  parallèle à l'interface pour une sous-bande de trous lourds HH, calculées par méthode  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  (figure de gauche) ou dans l'approximation de la masse effective (figure de droite).

L'application de la théorie des perturbations au terme  $\vec{k} \cdot \vec{p}$  de l'Equation 2.6 conduit à une équation matricielle unique pour les 3 bandes considérées (6 en considérant le spin). Pour une position  $z$  donnée, elle s'écrit [22] :

$$\left[ H\left(k_{\parallel}, -i\frac{\partial}{\partial z}\right) + \mathbf{I} \cdot E_{\text{pot}}(z) \right] \psi_{k_{\parallel}}(z) = E_{k_{\parallel}} \psi_{k_{\parallel}}(z) \quad (2.13)$$

avec les définitions suivantes :

- $H(k_{\parallel}, -i\partial/\partial z)$  : Hamiltonien défini ci-dessous (Equation 2.14) en explicitant l'opérateur  $k_z = -i\partial/\partial z$  [22] et avec  $k_{\parallel}^2 = k_x^2 + k_y^2$ ,
- $\mathbf{I}$  : matrice identité  $6 \times 6$ ,
- $E_{\text{pot}}(z)$  : énergie potentielle au point  $z$ ,
- $\psi_{k_{\parallel}}(z)$  : vecteur  $6 \times 1$ , correspondant aux valeurs prises par les fonctions d'onde des 3 bandes doublement dégénérées au point  $z$  et pour un  $k_{\parallel}$  donné,
- $E_{k_{\parallel}}$  : vecteur  $6 \times 1$ , donnant les énergies totales pour chaque bande pour un  $k_{\parallel}$  donné.

L'Hamiltonien  $6 \times 6$  est la somme d'un Hamiltonien  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  et d'un Hamiltonien dû au couplage spin orbite (laissant apparaître la bande Split-Off (SO) à  $\Delta_0 = 44\text{meV}$

du maximum de la bande de valence) :

$$\begin{aligned}
 H &= H_{k \cdot p} + H_{so} \\
 &= \begin{pmatrix} h_{xx} & 0 & h_{xy} & 0 & h_{xz} & 0 \\ 0 & h_{xx} & 0 & h_{xy} & 0 & h_{xz} \\ h_{xy} & 0 & h_{yy} & 0 & h_{yz} & 0 \\ 0 & h_{xy} & 0 & h_{yy} & 0 & h_{yz} \\ h_{xz} & 0 & h_{yz} & 0 & h_{zz} & 0 \\ 0 & h_{xz} & 0 & h_{yz} & 0 & h_{zz} \end{pmatrix} + \frac{\Delta_0}{3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & i & -1 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & -i & 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & -1 & 0 & i & 0 & 0 \\ 1 & 0 & i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.14)
 \end{aligned}$$

avec :

$$\begin{aligned}
 h_{\alpha\alpha} &= Lk_\alpha^2 + M(k_\beta^2 + k_\gamma^2), \\
 h_{\alpha\beta} &= Nk_\alpha k_\beta,
 \end{aligned} \quad (2.15)$$

où  $L$ ,  $M$  et  $N$  sont les paramètres de Luttinger, paramètres propres au Silicium [22] et les indices  $(\alpha, \beta, \gamma)$  égaux à  $(x, y, z)$  ou à une permutation circulaire des trois indices. Les grandeurs du type  $h_{\alpha\beta}$  sont caractéristiques du couplage entre les bandes. Les annuler rendrait l'Hamiltonien diagonal (termes en  $k_\alpha^2$  correspondant à une dérivée seconde) et l'équation de Schrödinger (Equation 2.13) pourrait être séparées en autant de d'équations que de bandes considérées, comme dans l'approximation de la masse effective. A noter que cette méthode permet le calcul de structure de bandes d'autres matériaux (en changeant les paramètres de Luttinger [15]), et éventuellement contraints (en additionnant une matrice de contraintes à l'Hamiltonien [30]).

La résolution de l'Equation 2.13 dans une structure MOS unidimensionnelle suivant  $z$  consiste en la diagonalisation d'une matrice  $6N \times 6N$ , avec  $N$  le maillage spatial. De plus, contrairement à l'approximation de la masse effective où l'équation de Schrödinger est résolue une fois en  $\vec{k} = \vec{0}$ , l'anisotropie des bandes HH, LH et SO prise en compte dans la méthode  $k \cdot p$  impose de résoudre l'équation pour différentes valeurs de  $k_{\parallel}$  pour pouvoir calculer la DOS 2D.

Intégrer une approche  $k \cdot p$  complète au sein d'une simulation Poisson-Schrödinger est donc excessivement lourd en temps de calcul. Une approche alternative a été proposée par De Michielis et al. [31] pour la simulation du courant de drain dans des transistors pMOS. Cette description  $k \cdot p$  simplifiée de la bande de valence a été intégrée dans la simulation Poisson-Schrödinger.

### Approximation de la méthode $k \cdot p$ $6 \times 6$

De Michielis et al. [31] proposent de reproduire les résultats obtenus par une méthode  $k \cdot p$   $6 \times 6$  à l'aide d'une approche masse effective. La charge de trous est ainsi calculée en résolvant 3 équations de Schrödinger découplées<sup>9</sup>, dont les paramètres (densité d'état et masses de confinement) sont calibrés sur les résultats  $k \cdot p$  et rendent compte du couplage entre les différentes sous-bandes :

9. Une par famille de sous-bandes, suivant ainsi une approche identique à l'approximation de la masse effective.

### 3. Modélisation du confinement quantique

1. les masses de confinement  $m_\nu$  de chaque bande HH, LH et SO sont ajustées pour reproduire les résultats en  $k_\parallel = 0$ ,
2. la relation de dispersion dans le plan parallèle  $k_\parallel(E_\parallel, \theta)$  obtenue par la méthode  $k \cdot p$  est approximée par une formule analytique et empirique permettant le calcul de la DOS 2D.

L'équation de Schrödinger est résolue dans différents puits de potentiel à l'aide de la méthode  $k \cdot p$  en  $k_\parallel = 0$  et l'approche masse effective reproduit les énergies quantifiées  $\varepsilon_{n,\nu}$  pour  $m_{\text{HH}} = 0.2687m_0$ ,  $m_{\text{LH}} = 0.2249m_0$  et  $m_{\text{SO}} = 0.2085m_0$  (Figure 2.9).

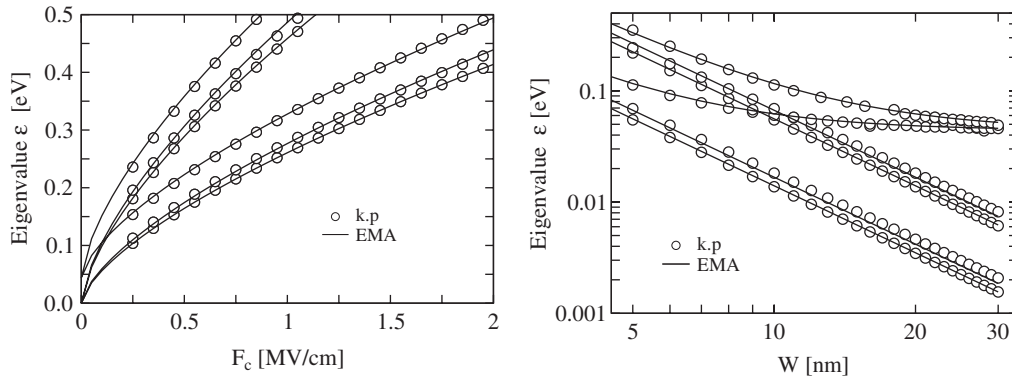


FIGURE 2.9 – Energies quantifiées  $\varepsilon_{n,\nu}$  ( $n = 0, 1$  et  $\nu = \text{HH, LH, SO}$ ) obtenues en  $k_\parallel = 0$  par la méthode  $k \cdot p$  et l'approche masse effective calibrée sur les résultats  $k \cdot p$  (EMA). Les 2 approches sont comparées dans un puits triangulaire soumis à différents champs électriques  $F_c$  et un puits carré de largeur  $W$  variable (figures extraites de [32]).

Les relations de dispersion HH, LH et SO dans le plan parallèle sont approximées dans trois directions caractéristiques  $d = 0, \pi/8$  et  $\pi/4$  (symétrie des courbes isoénergétiques par rotation  $\pi/2$ , cf. Figure 2.8) par :

$$k_{\parallel,\nu,d}(E_\parallel) = \left( \frac{2m_0 E_\parallel}{\hbar^2} \right)^{1/2} \left( \frac{1}{a_{\nu,d} + b_{\nu,d} E_\parallel} + c_{\nu,d} \right)^{-1/2}, \quad (2.16)$$

avec les paramètres empiriques donnés dans le Tableau 2.1.

La relation de dispersion est ensuite généralisée pour toute direction  $\theta$  par :

$$\begin{aligned} k_{\parallel,\nu}(E_\parallel, \theta) = & \frac{1}{4} [k_{\parallel,\nu,0}(E_\parallel) + 2k_{\parallel,\nu,\pi/8}(E_\parallel) + k_{\parallel,\nu,\pi/4}(E_\parallel)] \\ & + \frac{1}{2} [k_{\parallel,\nu,0}(E_\parallel) - k_{\parallel,\nu,\pi/4}(E_\parallel)] \cos(4\theta) \\ & + \frac{1}{4} [k_{\parallel,\nu,0}(E_\parallel) - 2k_{\parallel,\nu,\pi/8}(E_\parallel) + k_{\parallel,\nu,\pi/4}(E_\parallel)] \cos(8\theta), \end{aligned} \quad (2.17)$$

$\nu$	$d$	$a_{\nu,d}$	$b_{\nu,d} [\text{eV}^{-1}]$	$c_{\nu,d}$
HH	0	0.3077	48.0072	0.8258
	$\pi/8$	0.3695	248.0561	1.1991
	$\pi/4$	0.4071	110.462	0.4109
LH	0	0.4239	51.442	0.85
	$\pi/8$	1.8271	20.1326	1.0542
	$\pi/4$	0.3766	71.5079	1.9608
SO	0	-0.3052	-5.4514	3.74
	$\pi/8$	-3.7119	-31.1138	1.4343
	$\pi/4$	-0.5866	-89.5203	1.8320

TABLEAU 2.1 – Paramètres empiriques utilisés pour approximer les relations de dispersion  $k_{\parallel,\nu}(E_{\parallel})$  obtenues par la méthode k · p  $6 \times 6$  dans 3 directions principales  $d = 0, \pi/8$  et  $\pi/4$ .

et permet le calcul analytique de la DOS 2D grâce à l'Equation 2.8.

Cette méthode, validée dans l'étude du transport de trous [31], a été introduite dans notre simulation et son impact mesuré dans le paragraphe 5.2.

## 4 Résolution numérique de l'auto-cohérence

La résolution numérique Poisson-Schrödinger présente de nombreux défis : un compromis doit être trouvé entre le temps de calcul et la précision de la simulation souhaitée. Nous présentons dans cette section les enjeux posés par l'intégration de la résolution auto-cohérente dans un simulateur numérique et les solutions apportées.

### 4.1 Convergence de la boucle auto-cohérente

Nous avons défini dans la section 1 le schéma de la boucle de convergence à résoudre (Figure 2.2). Le simulateur développé pendant cette thèse suit ce schéma, à une nuance près concernant le traitement de l'équation de Poisson.

En effet, reprenant les notations de ce schéma, le profil de potentiel inconnu au cours de la  $i^{\text{ème}}$  itération  $V_i$  s'obtient à partir de la charge  $\rho_i$  selon :

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \varepsilon \frac{\partial V_i}{\partial z} \right) = -\rho_i, \quad (2.18)$$

La résolution numérique de cette équation est possible, mais le potentiel solution  $V_i$  calculé à partir de l'Equation 2.18 entraîne une divergence de la boucle auto-cohérente une fois réinjecté dans l'équation de Schrödinger pour le calcul de  $\rho_{i+1}$ . Le schéma de la Figure 2.2 est donc instable. Pour assurer la convergence Poisson-Schrödinger, deux méthodes peuvent être utilisées :

- La méthode d'*over-relaxation* [1] consiste à résoudre l'Equation 2.18 et à réinjecter dans l'équation de Schrödinger non pas le potentiel  $V_i$  mais une combinaison linéaire de cette solution et de la solution précédente :  $V_i = \alpha V_i + (1 - \alpha) V_{i-1}$  avec  $0 < \alpha \leq 1$ . Une valeur de  $\alpha$  proche de 0 assure une convergence certaine bien que lente, alors qu'une valeur proche de 1 accroît la vitesse de résolution en multipliant les risques de divergence.
- La méthode *Newton-Raphson* [8, 33] est une méthode numérique reposant sur l'approximation au premier ordre  $f(x_0 + \delta) \approx f(x_0) + \delta f'(x_0)$ . Appliquée à l'équation de Poisson, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \varepsilon \frac{\partial V_i}{\partial z} \right) = -\rho_i = - \left[ \rho_{i-1} + \frac{\partial \rho}{\partial V} \Big|_i (V_i - V_{i-1}) \right] \quad (2.19)$$

avec les indices  $i-1$  dénotant les résultats à l'itération précédente.

Les relations de proportionnalité suivantes dans l'approche classique :

$$\begin{aligned} n_i &\propto e^{eV_i/k_B T} \\ p_i &\propto e^{-eV_i/k_B T}, \end{aligned} \quad (2.20)$$

aboutissent à l'équation :

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \varepsilon \frac{\partial V_i}{\partial z} \right) + \frac{e}{k_B T} (n_i - p_i) V_i = -\rho_{i-1} + \frac{e}{k_B T} (n_i - p_i) V_{i-1}, \quad (2.21)$$



Cette équation est la relation de Poisson à résoudre au cours de l'itération  $i$  pour aboutir à une convergence certaine. Le schéma de principe présenté Figure 2.2 est donc modifié, le calcul de  $V_i$  reposant non seulement sur  $\rho_i$  mais aussi  $V_{i-1}$ .

La méthode Newton-Raphson allie rapidité de convergence et précision, a été démontrée plus efficace que la méthode d'over-relaxation [34, 35, 36] et donc retenue dans le cadre de cette thèse.

Enfin, en pratique, la convergence est considérée atteinte quand les profils de potentiel obtenus aux itérations  $i$  et  $i-1$  sont égaux, ou du moins différents dans une limite fixée par un critère de convergence  $\Delta$  :

$$\frac{1}{L_{\max}} \int_0^{L_{\max}} \left[ \frac{V_i(z) - V_{i-1}(z)}{V_i} \right]^2 dz < \Delta, \quad (2.22)$$

avec une valeur de  $\Delta$  que nous avons choisie égale à  $10^{-4}$ . De plus, pour garantir une convergence rapide de la simulation d'un point de polarisation  $j$ , le potentiel  $V(z)$  au départ de la boucle auto-cohérente est tout simplement égal à la solution de la résolution au point de polarisation  $j-1$ , considéré comme proche.

### 4.2 Découpage quantique - classique de la structure simulée

Pour des raisons de temps de calcul, le calcul de la concentration des porteurs ne peut pas être effectué sur des structures de plusieurs centaines de nanomètres dans une approche purement quantique.

La simulation Poisson-Schrödinger mise en place au cours de cette thèse considère donc une approche quantique dans une zone proche de l'interface (zone incluant diélectrique(s) de grille et substrat de Silicium), et une approche classique en profondeur du substrat comme montré Figure 2.10.

Dans la zone quantique, la concentration de charge (en  $\text{C.m}^{-3}$ ) est obtenue en résolvant l'équation de Schrödinger (Eq. 2.3). Dans la zone classique, en prenant l'exemple des électrons des vallées L, elle est donnée par :

$$\rho_L(z) = -e N_{cL} F_{1/2} \left( -\frac{E_g - E_F + E_{\text{pot}}(z)}{k_B T} \right), \quad (2.23)$$

avec  $E_g$  le gap du Silicium,  $E_F$  la position du niveau de Fermi par rapport à la bande de valence et  $N_{cL}$  la densité effective d'états pour les électrons L de la bande de conduction. L'intégrale de Fermi-Dirac est définie par :

$$F_{1/2}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\mu}}{1 + \exp(\mu - x)} d\mu. \quad (2.24)$$

Les concentrations classiques d'électrons T, de trous HH et de trous LH s'écrivent pareillement, et les densités effective d'états  $N_{cT}$ ,  $N_{vHH}$  et  $N_{vLH}$  sont définies de

#### 4. Résolution numérique de l'auto-cohérence

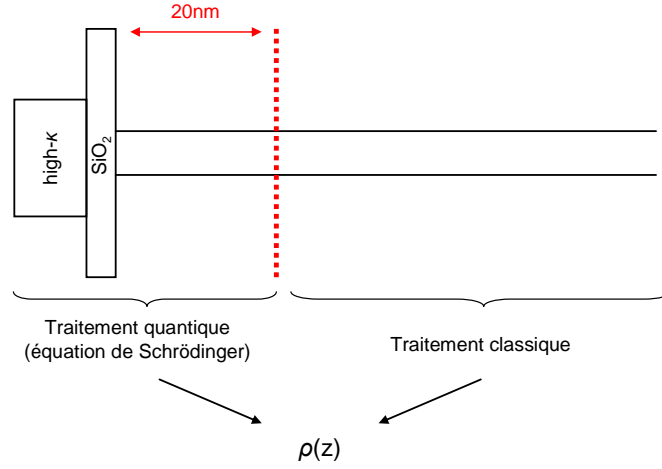


FIGURE 2.10 – Structure simulée et traitement séparé quantique / classique. Une fois le profil de charge  $\rho(z)$  obtenu, la résolution auto-cohérente se poursuit en appliquant l'équation de Poisson.

Electrons	$N_{cL} = 9,23 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$ $N_{cT} = 1,84 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$	$N_c = 2,76 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$
Trous (approche parabolique)	$N_{vHH} = 1,72 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$ $N_{vLH} = 3,2 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$	$N_v = 2,04 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$
Trous (approche $k \cdot p$ )	$N_{vHH} = 1,53 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$ $N_{vLH} = 6,74 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$ $N_{vSO} = 1,37 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$	$N_v = 2,34 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$

TABLEAU 2.2 – Densités effectives d'états utilisées pour assurer la continuité classique - quantique. Selon la description retenue pour la bande de valence, les densités de trous sont différentes.

manière à assurer la continuité traitement quantique - approche classique et sont données à température ambiante dans le Tableau 2.2.

La Figure 2.11 montre les solutions quantique et classique pour une même structure simulée pMOS, en condition d'accumulation d'électrons. L'ajustement des deux solutions est en effet critique pour les porteurs majoritaires, la concentration de minoritaires à 20nm de l'interface étant négligeable. En bord de boîte quantique, les fonctions d'onde s'annulent et créent une zone artificiellement pauvre en charge. La solution classique est donc ainsi raccordée quelques angströms avant ce bord de zone pour assurer une transition sans discontinuité.

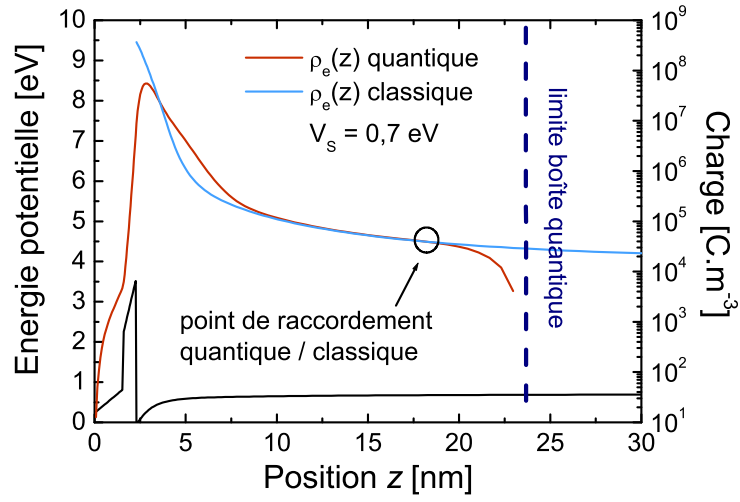


FIGURE 2.11 – Densité de charge portée par les électrons en régime d'accumulation pMOS pour les approches quantique et classique. La limite de la zone de simulation quantique est choisie à 20nm de l'interface (dopage  $N_d = 2 \cdot 10^{23} \text{ m}^{-3}$ ).

## 5 Résultats et discussions

### 5.1 Impact de la pénétration des fonctions d'onde

Dans cette section, nous étudions l'impact de la pénétration des fonctions d'onde sur les caractéristiques électriques de diverses structures nMOS. L'ensemble des résultats de simulation proposé a été obtenu (sauf mention contraire) pour des structures Silicium p ( $N_a = 2 \cdot 10^{23} \text{ m}^{-3}$ ) - oxyde interfacial  $\text{SiO}_2$  - high- $\kappa$   $\text{HfO}_2$  - grille métallique TiN, et en considérant une approche masse effective pour la description de la bande de valence.

#### 5.1.1 Epaisseurs physique et électrique d'un empilement diélectrique

La capacité totale  $C$  d'une structure MOS à grille métallique est la mise en série de la capacité  $C_{\text{ox}}$  des diélectriques de grille avec la capacité  $C_s$  du Silicium, dépendante du champ. La caractéristique expérimentale d'un empilement est donc :

$$C(V_g)^{-1} = C_{\text{ox}}^{-1} + C_s(V_g)^{-1}, \quad (2.25)$$

et la connaissance de  $C_s$  permet l'extraction de l'EOT.

1. Dans une approche classique, on considère que le pic de charge est situé à l'interface Si-SiO<sub>2</sub> (cf. Figure 2.11). La capacité du semiconducteur  $C_s$  est alors considérée nulle et à fort champ :

$$C(V_g) = C_{\text{ox}} = \varepsilon_{\text{SiO}_2}/\text{EOT} \quad (2.26)$$

2. Dans une approche quantique, un décalage du pic de charges est observé (quelques angströms) : l'annulation des fonctions d'onde au voisinage de l'interface induit une zone désertée de porteurs entre l'interface et le pic, appelée *darkspace*<sup>10</sup>. La simulation Poisson-Schrödinger prend tout son sens dès lors que le darkspace  $X$  devient du même ordre de grandeur que l'EOT à évaluer. La résolution auto-cohérente permet en effet de calculer :

$$C_s(V_g) = \varepsilon_{\text{SiO}_2}/X(V_g) \quad (2.27)$$

Les Equations 2.25, 2.26 et 2.27 permettent de définir le CET, épaisseur équivalente électrique de la structure MOS :

$$\text{CET}(V_g) = \frac{\varepsilon_{\text{SiO}_2}}{C(V_g)} = \text{EOT} + X(V_g), \quad (2.28)$$

Pour des EOT élevés, le darkspace est négligeable, d'où  $\text{EOT} = \text{CET}$  et la validité de l'approche classique.

---

10. Le darkspace est noté  $X$  et est exprimé en équivalent-électrique-SiO<sub>2</sub> :

$X = \text{distance interface/pic} \times \varepsilon_{\text{SiO}_2}/\varepsilon_{\text{Si}}$ .

### 5.1.2 Pénétration des fonctions d'onde et extraction d'EOT

La Figure 2.12 montre les caractéristiques  $C(V_g)$  calculées par le simulateur Poisson-Schrödinger pour un empilement présentant un EOT constant de 1,23nm, avec ou sans prise en compte de la pénétration des fonctions d'onde. Nous remarquons tout d'abord l'écart entre les maxima des caractéristiques simulées et  $C_{ox}$ , dû au darkspace. De plus, la valeur du darkspace semble différer selon qu'on considère ou non la pénétration des fonctions d'onde.

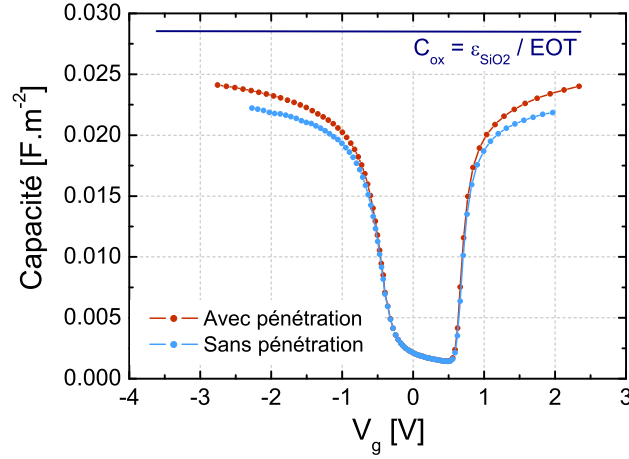


FIGURE 2.12 – Caractéristiques  $C(V_g)$  d'un empilement 0.8nm SiO<sub>2</sub> - 2nm HfO<sub>2</sub> (EOT = 1.23nm), simulées avec ou sans pénétration des fonctions d'onde.

A partir de l'Equation 2.28, la Figure 2.13 montre l'évolution du darkspace en fonction de  $V_g$ , c'est-à-dire la différence entre les épaisseurs physique et électrique de l'empilement. La non-prise en compte de la pénétration des fonctions d'onde entraîne ainsi une erreur d'environ 1Å dans l'évaluation du darkspace, et donc de l'EOT. La roadmap ITRS HP prévoit des EOT inférieurs à 1nm dès le nœud 32nm<sup>11</sup>. Une erreur de 1Å dans son extraction (donc de 10%) n'est pas acceptable et la prise en compte de la pénétration des fonctions d'onde s'avère indispensable.

Dans le cadre de cette étude, l'intégration des diélectriques dans la structure simulée est critique. En effet, dans une approche expérimentale conventionnelle, l'EOT est extrait en s'appuyant sur une unique simulation quantique de  $C_s$ , et  $C_{ox}$  est déterminé en ajustant la caractéristique expérimentale à la théorie (Equation 2.25).

Un simulateur Poisson-Schrödinger ne prenant pas en compte la pénétration des fonctions d'onde simule seulement le substrat Silicium et donc  $C_s$ . La méthodologie conventionnelle d'extraction d'EOT est dans ce cas parfaitement valable.

Dans une approche plus réaliste prenant en compte la pénétration des fonctions

11. Source : <http://www.itrs.net/Links/2009ITRS/Home2009.htm>.

## 5. Résultats et discussions

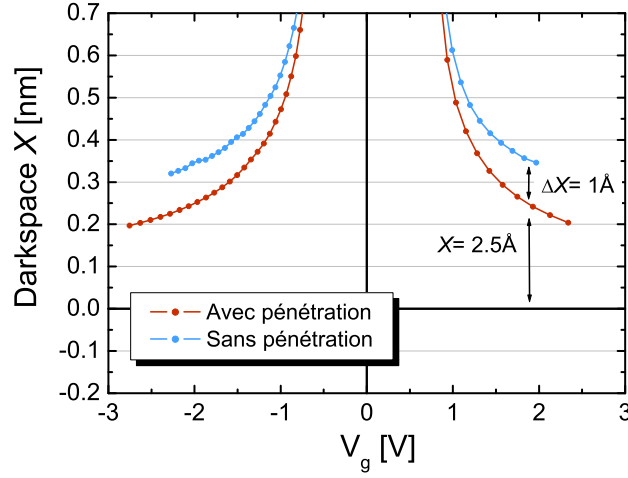


FIGURE 2.13 – Evolution du darkspace avec  $V_g$  dans un empilement 0.8nm SiO<sub>2</sub> - 2nm HfO<sub>2</sub> (EOT = 1.23nm), simulé avec ou sans pénétration des fonctions d’onde.

d’onde, l’EOT est un paramètre d’entrée de la simulation et seule la capacité totale  $C(V_g)$  est simulée. Dans ce cas, on peut penser que  $C_s$  est dépendant de l’EOT. A première vue, une approche rigoureuse nécessiterait différents résultats de simulations obtenus pour différents EOT pour ajuster une caractéristique expérimentale  $C(V_g)$  donnée.

Compte tenu du temps nécessaire pour aboutir à la résolution de l’auto-cohérence (environ 2h), cette approche est irréalisable. Nous faisons alors l’hypothèse que  $C_s$  ne varie pas, à champ constant, avec l’EOT. Une seule simulation Poisson-Schrödinger est alors à même de rendre compte de la charge pour des empilements d’épaisseur différente et la méthode conventionnelle précédemment citée est alors utilisée. La validité de cette hypothèse est discutée dans les sections suivantes.

### 5.1.3 Influence des paramètres tunnel des diélectriques

L’évanescence des fonctions d’onde dans les diélectriques de grille est une manifestation du courant tunnel. Dans ce paragraphe, nous étudions tout d’abord l’influence des paramètres tunnel du SiO<sub>2</sub> interfacial sur la pénétration des fonctions d’onde et le darkspace. En effet, dans un empilement high- $\kappa$ , la nature de l’oxyde interfacial peut légèrement différer du SiO<sub>2</sub> pur, entraînant une variation de ses paramètres communément admis. Dans une seconde partie, l’influence de la nature du high- $\kappa$  sur le darkspace et donc la simulation de  $C_s$  sera étudiée.

Pour des raisons de clarté, seule la pénétration des fonctions d’onde des électrons de la bande de conduction est commentée, en condition d’inversion (cas d’une structure nMOS, substrat p). Les analyses et commentaires restent néanmoins valables pour les trous de la bande de valence, pour lesquels l’effet de la pénétration intervient en régime d’accumulation nMOS, ainsi que pour une structure pMOS

(inversion de trous, accumulation d'électrons).

Les paramètres considérés sont :

- $m_{\text{SiO}_2}$  et  $m_{\text{HfO}_2}$  : masses tunnel des électrons dans le  $\text{SiO}_2$  et le  $\text{HfO}_2$  (en unités de  $m_0$ , masse de l'électron libre),
- $\phi_{\text{SiO}_2}$  et  $\phi_{\text{HfO}_2}$  : hauteurs de barrière du  $\text{SiO}_2$  et du  $\text{HfO}_2$  par rapport à la bande de conduction du Silicium (en eV).

Dans un diélectrique d'épaisseur donnée, le courant tunnel est d'autant plus important que ces paramètres sont faibles : dans ce cas, nous attendons donc une concentration d'électrons dans l'empilement de grille plus importante.

La structure simulée est un empilement  $8\text{\AA}$   $\text{SiO}_2$  -  $2\text{nm}$   $\text{HfO}_2$ , soit un EOT de  $1,23\text{nm}$ . Les paramètres tunnel du diélectrique  $\text{HfO}_2$  simulé sont constants ( $m_{\text{HfO}_2} = 0,2m_0$  et  $\phi_{\text{HfO}_2} = 2,2\text{eV}$ ) et différentes valeurs de paramètres  $\text{SiO}_2$  sont simulées, variant fortement autour des valeurs communément admises dans la littérature<sup>12</sup>. La Figure 2.14 montre une concentration de charges dans l'empilement suivant une tendance attendue : elle augmente quand les grandeurs  $m_{\text{SiO}_2}$  et  $\phi_{\text{SiO}_2}$  diminuent, c'est-à-dire quand le courant dû à l'effet tunnel augmente.

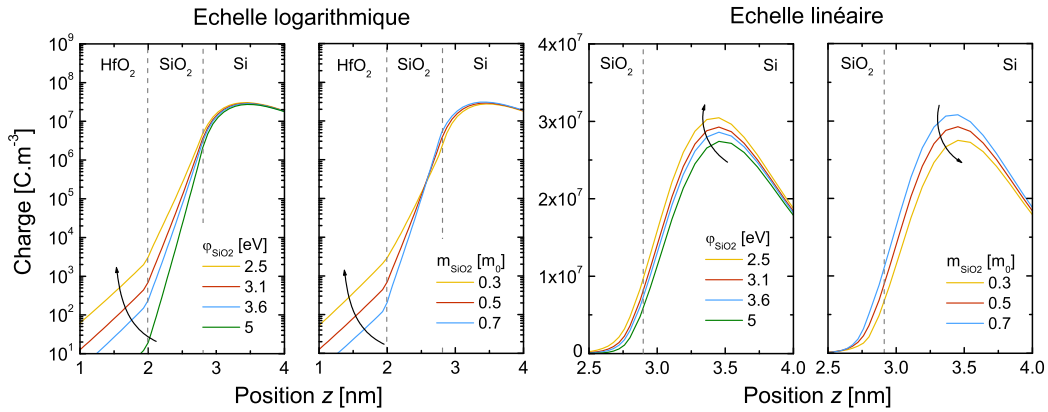


FIGURE 2.14 – Concentration de charge des électrons en fonction des paramètres tunnel de l'oxyde interfacial  $m_{\text{SiO}_2}$  et  $\phi_{\text{SiO}_2}$  à  $V_g = 2\text{V}$ .

De plus, la concentration d'électrons tracée en échelle linéaire montre une légère variation de la position du pic de charge (et donc du darkspace) en fonction des paramètres tunnel  $\text{SiO}_2$  considérés. La Figure 2.15 montre une augmentation du darkspace quand  $\phi_{\text{SiO}_2}$  augmente et une évolution inverse quand  $m_{\text{SiO}_2}$  augmente.

Intuitivement, une augmentation de la charge évanescence dans le  $\text{SiO}_2$  tendrait à décaler le pic de charge vers la grille et donc diminuer le darkspace. Ce décalage est observé en faisant varier  $\phi_{\text{SiO}_2}$ , mais une variation de  $m_{\text{SiO}_2}$  montre un comportement inverse. Cette observation est validée en considérant la relation analytique approximant la valeur du darkspace  $X$  en fonction des paramètres de l'oxyde de

12.  $m_{\text{SiO}_2} = 0,5m_0$  et  $\phi_{\text{SiO}_2} = 3,1\text{eV}$  [37].

## 5. Résultats et discussions

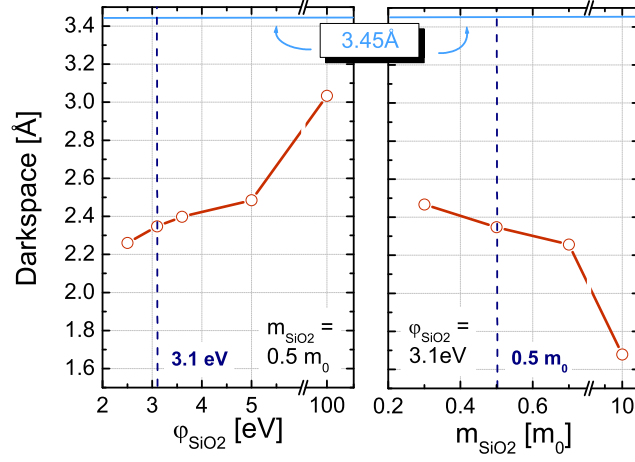


FIGURE 2.15 – Evolution du darkspace en fonction des paramètres tunnel de l’oxyde interfacial  $m_{\text{SiO}_2}$  et  $\phi_{\text{SiO}_2}$  à  $V_g = 2\text{V}$ . Le trait plein bleu montre la valeur du darkspace obtenue sans simuler la pénétration des fonctions d’onde.

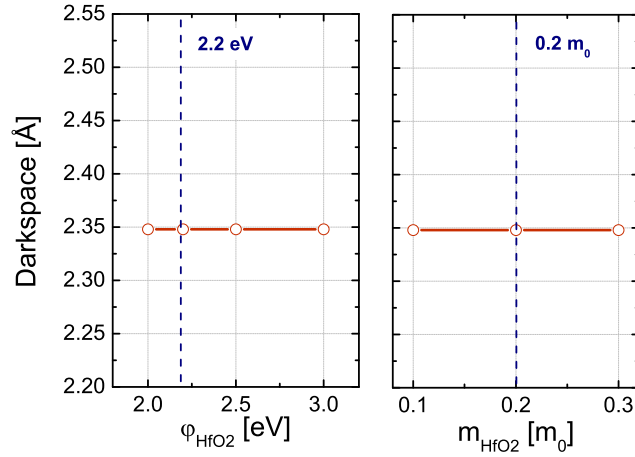


FIGURE 2.16 – Evolution du darkspace en fonction des paramètres tunnel du  $\text{HfO}_2$   $m_{\text{HfO}_2}$  et  $\phi_{\text{HfO}_2}$  à  $V_g = 2\text{V}$ . Les pointillés bleus représentent les valeurs communément admises dans la littérature.

grille [38], qui conduit à la relation de proportionnalité suivante :

$$X \propto \frac{\sqrt{m_{\text{SiO}_2}}}{\sqrt{\phi_{\text{SiO}_2}}}, \quad (2.29)$$

qui explique l’influence opposée de ces 2 paramètres sur l’évolution du darkspace.

Une variation raisonnable des paramètres tunnel  $\text{SiO}_2$  n’entraîne qu’une variation limitée du darkspace ( $\sim 0,1 \text{ \AA}$ ). Considérer le diélectrique interfacial comme étant du  $\text{SiO}_2$  pur est donc une hypothèse valide pour l’extraction d’EOT : même si



la nature de ce matériau devait légèrement différer, une variation de ses paramètres tunnel n'a que peu d'impact sur l'EOT extrait.

Nous considérons maintenant les paramètres tunnel du  $\text{SiO}_2$  constants :  $m_{\text{SiO}_2} = 0,5m_0$  et  $\phi_{\text{SiO}_2} = 3,1\text{eV}$ . La Figure 2.16 montre l'évolution du darkspace en fonction des paramètres tunnel  $\text{HfO}_2$  simulés. Aucune évolution n'est observée : en effet, la densité de charges présente dans le high- $\kappa$  est négligeable. Une légère variation de cette charge n'entraîne aucune modification du profil de charge à l'interface du Silicium. Une même simulation Poisson-Schrödinger est ainsi à même de rendre compte de différents matériaux high- $\kappa$ .

La Figure 2.17 illustre la pénétration des fonctions d'onde en montrant la part de charge évanescence dans les diélectriques de grille par rapport à la charge totale  $Q_{\text{sc}}(V_g)$  dans le semi-conducteur ( $Q(z < 0)/Q_{\text{sc}}$ ). On remarque ainsi une nouvelle fois que la charge évanescence dans le  $\text{HfO}_2$  est négligeable (inférieure à 0.001%), et que la part de charge dans l'oxyde interfacial n'excède pas 1% en régime d'inversion.

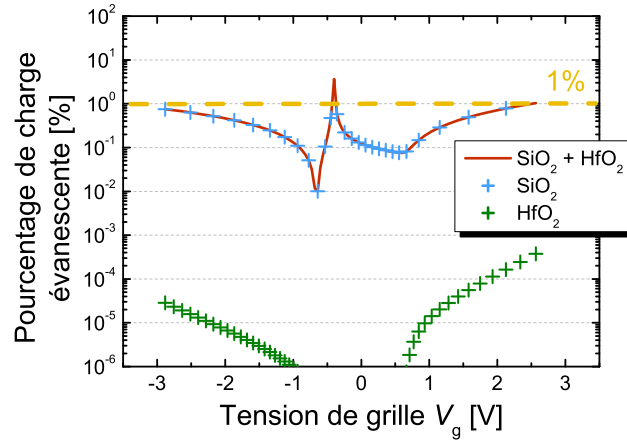


FIGURE 2.17 – Part de charges évanescences dans l'empilement par rapport à la charge totale dans le substrat Silicium.

Nous avons de plus vérifié que les charges présentes dans l'oxyde interfacial ont une influence insignifiante sur la chute de potentiel  $V_{\text{ox}}$  dans l'empilement diélectrique. En effet, dans le simulateur Poisson-Schrödinger mis en place, nous avons retenu pour le calcul de  $V_{\text{ox}}$  et donc de  $V_g$  une approche initialement appliquée dans les simulateurs ne prenant pas en compte la pénétration des fonctions d'onde, à savoir :

$$V_{\text{ox}}(V_g) = -Q_{\text{sc}}(V_g)/C_{\text{ox}}, \quad (2.30)$$

qui est l'application du théorème de Gauss à l'interface Si -  $\text{SiO}_2$ . Intégrer la part de charges évanescences dans le théorème de Gauss (approche plus réaliste) corrige le potentiel  $V_{\text{ox}}$  d'un maximum de 4mV en forte inversion, valeur considéré comme négligeable.

## 5. Résultats et discussions

### 5.1.4 Influence des épaisseurs des diélectriques

Nous étudions dans ce paragraphe l'évolution du darkspace dans des empilements présentant différents EOT. Nous souhaitons en effet valider l'indépendance de  $C_s$  avec  $C_{ox}$  pour ensuite permettre des extractions multiples d'EOT avec une seule simulation Poisson-Schrödinger.

La Figure 2.18 présente l'évolution du darkspace en fonction de la charge dans le semi-conducteur pour différentes épaisseurs de  $HfO_2$  avec  $t_{SiO_2} = cte = 0,8nm$  et différentes épaisseurs de  $SiO_2$  avec  $t_{HfO_2} = cte = 2nm$ . Cette évolution est ici tracée non plus en fonction de  $V_g$  mais à charge constante pour permettre une comparaison pertinente.

Nous remarquons des variations en fonction des différentes épaisseurs utilisées. Pour différentes épaisseurs de  $HfO_2$  entre 1nm et 4nm, la variation peut atteindre  $0,3 \text{ \AA}$  à fort champ, en inversion comme en accumulation. La même tendance est observée pour différentes épaisseurs de  $SiO_2$ . Ce résultat est sujet à caution : en raison de la décroissance exponentielle de la charge dès les premiers angströms de  $SiO_2$ , les variations d'épaisseurs sont censés n'avoir que peu d'influence sur le darkspace (comme observé précédemment dans le cas du  $HfO_2$  par exemple). Cette variation montre les limites numériques de la simulation mise en place. En effet, la condition limite forçant les fonctions d'onde à s'annuler à l'interface grille métal - high- $\kappa$  ne correspond pas à la réalité et peut fausser la position précise du pic de charges.

Malgré cette légère incertitude, nous n'avons pas souhaité complexifier la résolution numérique de l'auto-cohérence : à partir de la simulation d'un empilement constitué de 1nm de  $SiO_2$  et 2nm de  $HfO_2$ , nous considérons que nous pouvons rendre compte des caractéristiques  $C(V_g)$  d'une large gamme d'empilements jusqu'à une erreur maximale de  $0,2 \text{ \AA}$  sur l'extraction finale d'EOT, erreur qui reste acceptable.

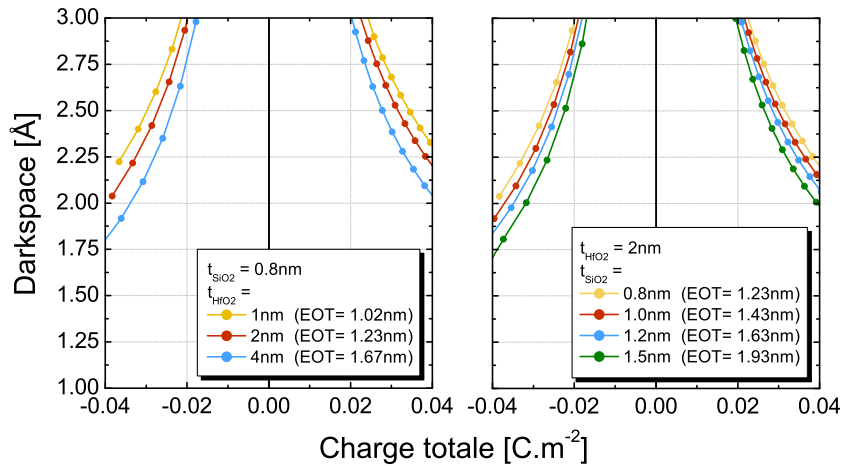


FIGURE 2.18 – Evolution du darkspace en fonction de la charge dans le semi-conducteur pour différents empilements simulés.

### 5.1.5 Validation expérimentale

Dans ce paragraphe, nous utilisons un ensemble de caractéristiques expérimentales  $C(V_g)$  pour valider le simulateur développé. Différentes capacités MOS de surface  $100 \times 100 \mu\text{m}^2$  ont été caractérisées à l'aide d'un LCR Meter Agilent 4284A à une fréquence de 100kHz, différant seulement par le dopage substrat. Elles présentent les caractéristiques suivantes :

- substrat Silicium, dopé n ( $N_d = 2 \cdot 10^{21}$ ,  $4 \cdot 10^{23}$  et  $2 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$ ) ou p ( $N_a = 2 \cdot 10^{21}$  et  $5 \cdot 10^{23} \text{ m}^{-3}$ ) par épitaxie de Silicium dopé in-situ,
- 2nm de  $\text{SiO}_2$  thermique,
- grille métallique TiN 5nm.

Différentes simulations Poisson-Schrödinger ont été réalisées pour chaque valeur de dopage substrat en considérant une couche de 2nm de  $\text{SiO}_2$  dans la zone simulée. Les niveaux de dopage sont pris égaux aux valeurs nominales fournies : l'utilisation de substrats dopés in-situ permet de considérer que les échantillons testés sont des échantillons étalons, avec notamment une concentration de dopants constante en profondeur du substrat. Pour chaque empilement, l'EOT et  $V_{FB}$  sont extraits en ajustant les caractéristiques  $C(V_g)$  théoriques et expérimentales. Les Figures 2.19 et 2.20 montrent ces caractéristiques et les valeurs d'EOT et de  $V_{FB}$  extraites.

La simulation reproduit bien l'expérience pour les différents niveaux de dopage n ou p et les EOT extraits sont proches de la valeur attendue de 2nm. Ces valeurs présentent une faible variabilité, observation qui est cohérente avec des oxydes réalisés identiquement pour les différentes variantes de dopage substrat. On note également une distorsion des caractéristiques expérimentales à faible champ, non reproduite par la simulation. Des états d'interface dans le gap du Silicium induisent en effet une capacité parasite dont la valeur dépend du remplissage de ces pièges et donc de la polarisation.

Le Tableau 2.3 compare les EOT extraits avec une approche ne prenant pas en compte la pénétration des fonctions d'onde, approche retenue dans l'outil de simulation du LETI. Pour chaque dispositif, on retrouve un écart d'environ  $1\text{\AA}$  : ne pas prendre en compte la pénétration des fonctions d'onde sous-estime l'EOT. Les valeurs de  $V_{FB}$  extraites montrent en revanche un excellent accord entre les 2 approches (non montré ici dans un souci de clarté). Comparées à la théorie (écart entre niveaux de Fermi du Silicium et de la grille métallique *midgap*), elles montrent un écart  $\Delta V_{FB}$  différent selon qu'on considère une structure nMOS ou pMOS. Ces écarts peuvent être d'origines multiples :

- la grille métallique TiN n'est pas parfaitement *midgap*,
- des charges sont piégées en volume dans le  $\text{SiO}_2$ ,
- des charges à l'interface  $\text{SiO}_2$ -TiN induisent un dipôle et un décalage du travail de sortie du métal de grille.

Les procédés de croissance de l'oxyde ou de dépôt de grille sont néanmoins donnés identiques pour les différents dispositifs caractérisés et l'incohérence de  $\Delta V_{FB}$  observée entre nMOS et pMOS ne peut être expliquée par les éléments cités. De plus, une erreur sur le calcul du niveau de Fermi dans le semiconducteur est à exclure :

## 5. Résultats et discussions

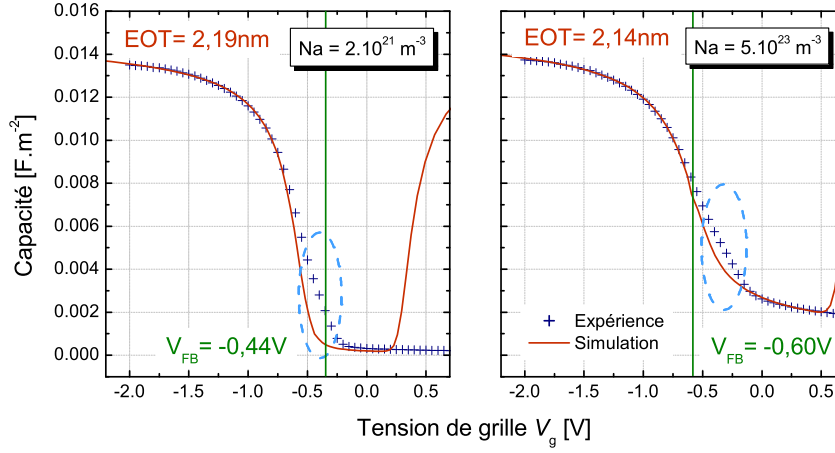


FIGURE 2.19 – Caractéristiques  $C(V_g)$  expérimentales et théoriques de capacités nMOS présentant des niveaux de dopage  $N_a = 2 \cdot 10^{21}$  et  $5 \cdot 10^{23} \text{ m}^{-3}$ . Les cercles bleus soulignent la zone perturbée par des pièges d'interface.

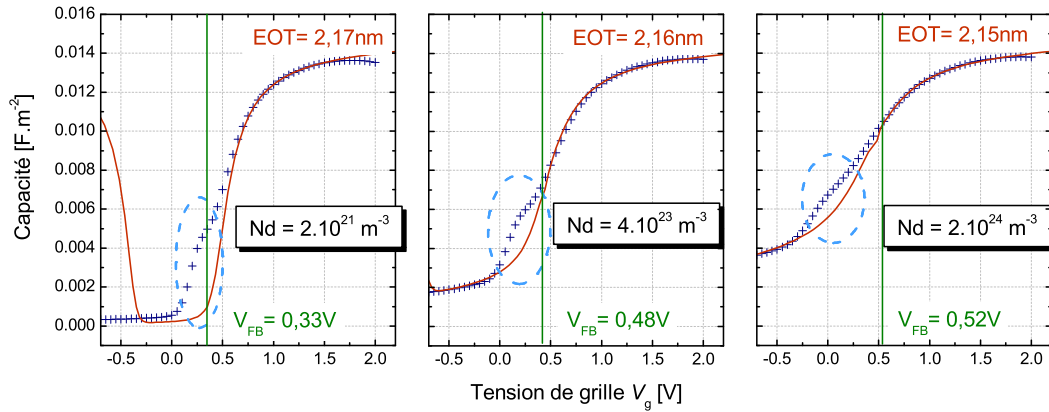


FIGURE 2.20 – Caractéristiques  $C(V_g)$  expérimentales et théoriques de capacités pMOS présentant des niveaux de dopage  $N_d = 2 \cdot 10^{21}$ ,  $4 \cdot 10^{23}$  et  $2 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$ .

revenir à une cohérence entre les valeurs de  $V_{FB}$  nMOS et pMOS nécessiterait de changer les valeurs de  $N_c$  et  $N_v$  (listées dans le Tableau 2.2) de plusieurs ordres de grandeur par rapport aux données de la littérature. Dans ce cas, il est difficile de conclure sans l'apport d'autres moyens de caractérisation permettant la mesure du travail de sortie de la grille ou de la quantité de pièges présente dans l'oxyde pour chaque dispositif.

Nous avons donc souligné la validité de la simulation Poisson-Schrödinger développée pour l'extraction de paramètres d'un empilement high- $\kappa$ . La prise en compte de la pénétration des fonctions d'onde est un développement majeur, dont l'import-

Dispositif	Dopage ( $\text{m}^{-3}$ )	EOT (nm)	EOT LETI (nm)	$\Delta\text{EOT}$ (Å)	$V_{\text{FB}}$ (V)	$\Delta V_{\text{FB}}$ (V)
nMOS	$2 \cdot 10^{21}$	2,19	2,10	0,9	-0,44	-0,117
nMOS	$5 \cdot 10^{23}$	2,14	2,06	0,8	-0,60	-0,134
pMOS	$2 \cdot 10^{21}$	2,16	2,09	0,7	0,33	0,016
pMOS	$4 \cdot 10^{23}$	2,18	2,09	0,9	0,48	0,028
pMOS	$2 \cdot 10^{24}$	2,16	2,08	0,8	0,52	0,026

TABLEAU 2.3 – EOT extraits suivant la simulation Poisson-Schrödinger développée et l'outil de simulation du LETI, ne prenant pas en compte la pénétration des fonctions d'onde. L'écart  $\Delta V_{\text{FB}}$  est la différence entre les valeurs théoriques et expérimentales de  $V_{\text{FB}}$ .

tance a été démontrée : ne pas modéliser ce phénomène conduit en effet à sous-estimer d'environ  $1\text{Å}$  l'EOT. Ce résultat, dans un premier temps obtenu par une approche purement numérique, a été confirmé expérimentalement. L'accord expérience - simulation pour différents niveaux de dopage n et p a également été montré.

## 5.2 Influence de la non-parabolicité de la bande de valence

L'ensemble des résultats précédemment obtenu l'a été en considérant une description parabolique de la bande de valence, dans l'approximation de la masse effective. Dans cette section, nous étudions l'impact d'une description plus avancée de la relation  $E(k)$  des trous sur la modélisation d'une caractéristique  $C(V_g)$  expérimentale et l'extraction d'EOT en régime d'accumulation nMOS.

L'approche retenue est la description analytique de la structure de bande de valence, calibrée sur des résultats  $k \cdot p$   $6 \times 6$  [31], présentée dans le paragraphe 3.2.3.

Les différences, importantes, observées entre les masses de confinement des 2 approches <sup>13</sup> laissent supposer une variation de la charge totale dans le semiconducteur et donc de la capacité de grille  $C(V_g)$ . Néanmoins, la Figure 2.21 montre pour de faibles énergies que la densité d'états 2D des trous présente un ordre de grandeur équivalent suivant qu'on considère une approche masse effective ou  $k \cdot p$ . La position des niveaux énergétiques quantifiés est plus faible pour l'approche masse effective (porteurs plus "lourds"), réduisant ainsi l'écart avec le niveau de Fermi. Néanmoins, l'augmentation consécutive de charge inhérente à cet effet est compensée par une DOS pour chaque sous-bande inférieure à celle obtenue par approche  $k \cdot p$   $6 \times 6$ .

La Figure 2.22 compare 2 caractéristiques  $C(V_g)$  simulées suivant les 2 descriptions proposées avec la caractéristique expérimentale d'un empilement Silicium p -  $0.8\text{nm SiO}_2$  -  $2\text{nm HfO}_2$ . L'EOT de  $1.22\text{nm}$  a été extrait en ajustant les simulations avec le régime d'inversion, pour lequel la description de la bande de valence

13. On rappelle leurs valeurs dans l'approximation de la masse effective ( $m_{\text{HH}} = 0,49m_0$ ,  $m_{\text{LH}} = 0,19m_0$ ) et dans l'approche calibrée sur les résultats  $k \cdot p$  ( $m_{\text{HH}} = 0,2687m_0$ ,  $m_{\text{LH}} = 0,2249m_0$ ,  $m_{\text{SO}} = 0,2085m_0$ ).

## 5. Résultats et discussions

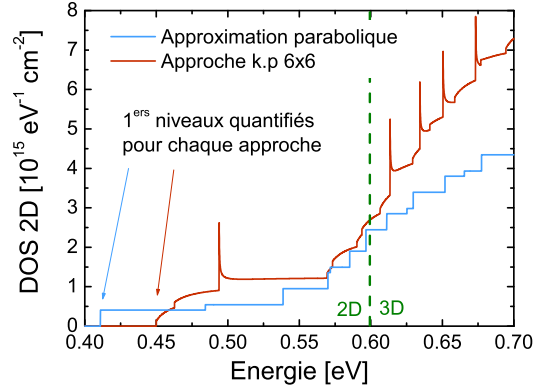


FIGURE 2.21 – Densité d'état 2D des trous de la bande de valence en régime d'accumulation nMOS, pour un potentiel de surface  $V_s = 0,6\text{eV}$ . Les porteurs avec une énergie inférieure à cette valeur sont confinés dans le puits d'accumulation (2D), les porteurs avec une énergie supérieure sont libres (3D).

n'a aucune influence. On constate ainsi que l'approche parabolique reproduit bien l'ensemble de la caractéristique, du régime d'accumulation au régime d'inversion. La description  $k \cdot p$   $6 \times 6$ , elle, peine à reproduire la capacité en régime d'accumulation. Un écart est observé, pouvant conduire à une erreur de  $0,5\text{\AA}$  sur l'extraction d'EOT.

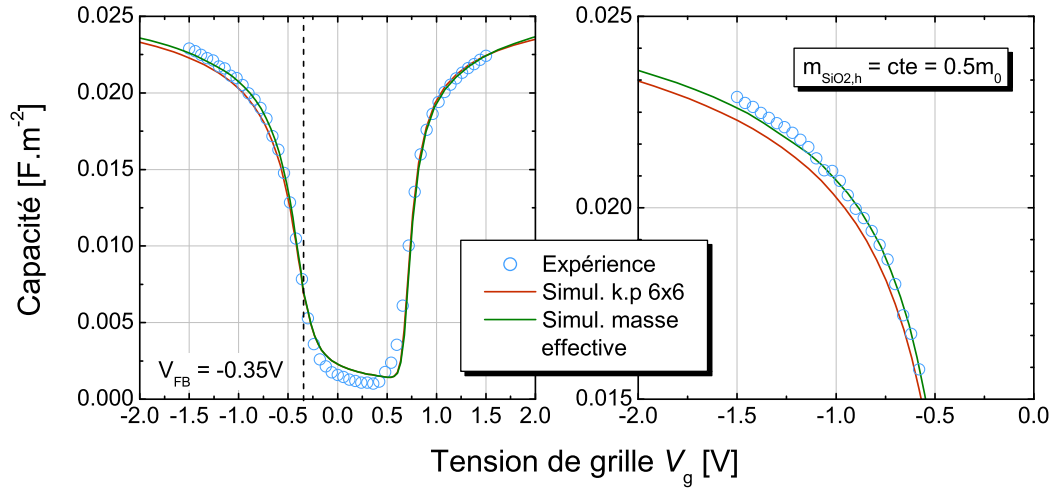


FIGURE 2.22 – Caractéristique  $C(V_g)$  expérimentale d'un empilement Silicium p -  $0,8\text{nm SiO}_2$  -  $2\text{nm HfO}_2$  comparée aux simulations suivant une description parabolique ou  $k \cdot p$   $6 \times 6$  de la bande de valence. La masse tunnel des trous  $m_{\text{SiO}_2,h}$  est constante et égale à  $0,5m_0$ .

Pour annuler cet écart et ainsi permettre à l'approche  $k \cdot p$   $6 \times 6$  de rendre compte de l'ensemble de la caractéristique  $C(V_g)$ , nous avons ajusté la masse tunnel des

trous dans le  $\text{SiO}_2$   $m_{\text{SiO}_2,h}$ , ce paramètre ayant un impact sur la pénétration des fonctions d'onde et le darkspace. Une masse  $m_{\text{SiO}_2,h} = 1.2m_0$  a été utilisée dans ce cas et la simulation  $k \cdot p$   $6 \times 6$  comparée à l'expérience est montrée Figure 2.23. Ce changement de paramètre n'impacte bien sûr pas la simulation du régime d'inversion, et l'EOT extrait reste égal à 1.22nm. La masse tunnel des trous utilisée pour assurer un bon accord expérience - théorie reste sujette à caution et sera discutée dans le chapitre 3 dans le cadre du transport tunnel de trous dans l'empilement diélectrique.

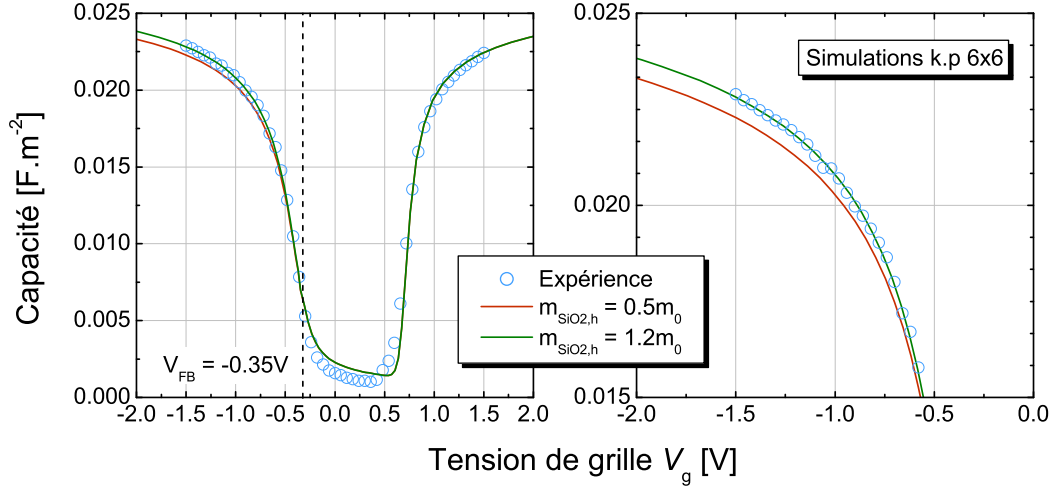


FIGURE 2.23 – Caractéristique  $C(V_g)$  expérimentale d'un empilement Silicium p - 0.8nm  $\text{SiO}_2$  - 2nm  $\text{HfO}_2$  comparée à des simulations  $k \cdot p$   $6 \times 6$  pour différentes valeurs de masse tunnel des trous  $m_{\text{SiO}_2,h}$ .

Une description  $k \cdot p$   $6 \times 6$  de la bande de valence, à condition d'utiliser une masse tunnel de trous différente, ne constitue donc pas une avancée significative de la simulation Poisson-Schrödinger. Une simple approche parabolique permet en effet une extraction pertinente d'EOT et est à même de rendre compte de la totalité d'une caractéristique  $C(V_g)$  expérimentale. Néanmoins, cette description avancée est à reporter dans le cas de l'étude du transport, les différences observées sur la position des niveaux quantifiés pouvant influencer la modélisation du courant tunnel.

## 6 Conclusions du chapitre 2

La modélisation de l'effet de champ et du confinement quantique est un maillon indispensable de l'étude de la conduction tunnel dans un empilement high- $\kappa$ . Résoudre les équations couplées de Poisson et Schrödinger implique un investissement numérique important, nécessaire pour :

1. Simuler la caractéristique  $C(V_g)$  d'un empilement et en déduire l'EOT,  $V_{FB}$  et le dopage substrat par comparaison avec l'expérience,
2. Modéliser la distribution de la charge confinée à l'interface pour le calcul du courant tunnel.

Une analyse bibliographique détaillée a tout d'abord mis en évidence l'évolution de cette simulation depuis le début des années 1970 et les premiers travaux de Stern et Howard. Au fil du temps, les développements apportés par la communauté ont accompagné les évolutions technologiques de l'empilement MOS et ont notamment pris en compte le rôle croissant des effets quantiques. Aujourd'hui, l'EOT visé atteint l'échelle du nanomètre et un nouveau simulateur a dû être développé au sein de l'IMEP-LAHC et du CEA LETI pour permettre la simulation précise de ces empilements avancés. L'analyse de l'état de l'art nous a conduit à intégrer :

- la prise en compte de la pénétration des fonctions d'onde en incluant les diélectriques de grille dans la zone simulée,
- un traitement quantique unique pour les trous et les électrons (permettant de s'affranchir de l'approximation de la désertion totale), et ce pour tous les régimes de fonctionnement MOS (simulant donc les effets quantiques en condition de bandes plates),
- une description avancée de la bande de valence obtenue par simulation  $k \cdot p$   $6 \times 6$ .

La mise en œuvre numérique de la résolution auto-cohérente s'est heurtée au difficile compromis entre la précision recherchée et le temps de convergence. Nous avons ainsi choisi de délimiter la structure simulée en une zone quantique proche de l'interface de Silicium et une zone classique en profondeur du substrat, permettant un gain de temps de calcul substantiel. L'utilisation de la méthode Newton-Raphson pour la résolution de l'équation de Poisson assure de plus une convergence certaine des boucles auto-cohérentes.

Les caractéristiques  $C(V_g)$  simulées ont été comparées aux caractéristiques expérimentales d'empilements  $\text{SiO}_2$  et  $\text{SiO}_2$ -high- $\kappa$ , ce qui a permis de dégager les conclusions suivantes :

1. Le simulateur développé permet de reproduire les caractéristiques  $C(V_g)$  expérimentales d'empilements nMOS et pMOS, pour différentes valeurs de dopage substrat.
2. La prise en compte de la pénétration des fonctions d'onde est essentielle et permet de s'affranchir d'une erreur de 1Å sur l'extraction d'EOT,



3. A champ constant, la concentration de charge dans le Silicium est considérée indépendante de l'EOT. Une seule simulation Poisson-Schrödinger permet donc de simuler les caractéristiques  $C(V_g)$  de différents empilements de grille.
4. La description  $k \cdot p$   $6 \times 6$  de la bande de valence, nécessaire pour l'étude du transport de trous dans un canal d'inversion pMOS, n'apparaît pas pertinente pour l'étude du confinement. Une simple description parabolique est suffisante pour rendre compte des différentes caractéristiques électriques d'un empilement et extraire ses paramètres.

Le développement de cet outil de simulation permet donc une extraction précise des paramètres EOT,  $N_a$  et  $V_{FB}$  d'un empilement high- $\kappa$  et décrit précisément la charge à l'interface du Silicium, donnée essentielle pour la modélisation du courant tunnel.

## Bibliographie

- [1] F. Stern, “Iteration Methods for Calculating Self-Consistent Fields in Semiconductor Inversion Layers,” *Journal of Computational Physics*, vol. 6, no. 1, pp. 56 – 67, 1970. [21](#), [35](#)
- [2] —, “Self-Consistent Results for n-Type Si Inversion Layers,” *Physical Review B*, vol. 5, no. 12, pp. 4891–4899, 1972. [21](#)
- [3] C. Moglestue, “Self-Consistent Calculation of Electron and Hole Inversion Charges at Silicon - Silicon Dioxide Interfaces,” *Journal of Applied Physics*, vol. 59, no. 9, pp. 3175–3183, 1986. [21](#)
- [4] J. Sune, P. Olivo, and B. Ricco, “Self-Consistent Solution of the Poisson and Schrödinger Equations in Accumulated Semiconductor-Insulator Interfaces,” *Journal of Applied Physics*, vol. 70, no. 1, pp. 337–345, 1991. [21](#)
- [5] A. S. Spinelli, A. Benvenuti, and A. Pacelli, “Self-Consistent 2-D Model for Quantum Effects in n-MOS Transistors,” *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 45, no. 6, pp. 1342–1349, 1998. [21](#)
- [6] A. Pacelli, A. S. Spinelli, and L. M. Perron, “Carrier Quantization at Flat Bands in MOS Devices,” *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 46, no. 2, pp. 383–387, 1999. [21](#), [22](#)
- [7] J. Sune, P. Olivo, and B. Ricco, “Quantum-Mechanical Modeling of Accumulation Layers in MOS Structure,” *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 39, no. 7, pp. 1732 –1739, 1992. [21](#)
- [8] J. A. Lopez-Villanueva, I. Melchor, F. Gamiz, J. Banqueri, and J. A. Jimenez-Tejada, “A Model for the Quantized Accumulation Layer in Metal-Insulator-Semiconductor Structures,” *Solid-State Electronics*, vol. 38, no. 1, pp. 203–210, 1995. [21](#), [35](#)
- [9] C. Bowen, C. L. Fernando, G. Klimeck, A. Chatterjee, D. Blanks, R. Lake, J. Hu, J. Davis, M. Kulkarni, S. Hattangady, and I. C. Chen, “Physical Oxide Thickness Extraction and Verification Using Quantum Mechanical Simulation,” *International Electron Devices Meeting (IEDM)*, 1997, pp. 869–872. [21](#)
- [10] O. Simonetti, T. Maurel, and M. Jourdain, “Characterization of Ultrathin Metal-Oxide-Semiconductor Structures using Coupled Current and Capacitance-Voltage Models Based on Quantum Calculation,” *Journal of Applied Physics*, vol. 92, no. 8, pp. 4449–4458, 2002. [22](#)
- [11] S. Mudanai, L. F. Register, A. F. Tasch, and S. K. Banerjee, “Understanding the Effects of Wave Function Penetration on the Inversion Layer Capacitance of NMOSFETs,” *IEEE Electron Device Letters*, vol. 22, no. 3, pp. 145–147, 2001. [22](#)

- [12] W. K. Chim, J. X. Zheng, and B. H. Koh, “Modeling of Charge Quantization and Wave Function Penetration Effects in a Metal-Oxide-Semiconductor System with Ultrathin Gate Oxide,” *Journal of Applied Physics*, vol. 94, no. 8, pp. 5273–5277, 2003. [22](#)
- [13] M. M. A. Hakim and A. Haque, “Accurate Modeling of Gate Capacitance in Deep Submicron MOSFETs with High-K Gate-Dielectrics,” *Solid-State Electronics*, vol. 48, no. 7, pp. 1095–1100, 2004. [22](#)
- [14] M. Charbonnier, “Etude du travail de sortie pour les empilements nanométriques diélectrique haute permittivité / grille métallique,” Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2010. [22](#)
- [15] S. Richard, “Modélisation physique de la structure électronique, du transport et de l’ionisation par choc dans les matériaux IV-IV massifs, contraints et dans les puits quantiques,” Thèse de Doctorat, Université Paris XI, 2004. [23](#), [28](#), [32](#)
- [16] F. Rochette, “Etude et caractérisation de l’influence des contraintes mécaniques sur les propriétés du transport électronique dans les architectures MOS avancées,” Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2008. [23](#)
- [17] J. M. Luttinger and W. Kohn, “Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields,” *Physical Review*, vol. 97, no. 4, pp. 869–883, 1955. [23](#)
- [18] J. M. Luttinger, “Quantum Theory of Cyclotron Resonance in Semiconductors - General Theory,” *Physical Review*, vol. 102, no. 4, pp. 1030–1041, 1956. [23](#)
- [19] E. O. Kane, “Energy Band Structure in p-type Germanium and Silicon,” *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, vol. 1, no. 1-2, pp. 82 – 99, 1956. [23](#)
- [20] J. L. P. V. D. Steen, D. Esseni, P. Palestri, L. Selmi, and R. J. E. Huetting, “Validity of the Parabolic Effective Mass Approximation in Silicon and Germanium n-MOSFETs With Different Crystal Orientations,” *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 54, no. 8, pp. 1843 –1851, 2007. [24](#), [29](#)
- [21] Y. Fu and M. Willander, “Valence-Band Structure of Heavily Doped Silicon,” *Physics Letters A*, vol. 234, no. 6, pp. 483–487, 1997. [24](#)
- [22] M. V. Fischetti, Z. Ren, P. M. Solomon, M. Yang, and K. Rim, “Six-band k.p Calculation of the Hole Mobility in Silicon Inversion Layers : Dependence on Surface Orientation, Strain, and Silicon Thickness,” *Journal of Applied Physics*, vol. 94, no. 2, pp. 1079–1095, 2003. [24](#), [31](#), [32](#)
- [23] M. Luisier and A. Schenk, “Two-Dimensional Tunneling Effects on the Leakage Current of MOSFETs With Single Dielectric and High-k Gate Stacks,” *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 55, no. 6, pp. 1494 –1501, 2008. [24](#)

## Bibliographie

---

- [24] M. M. A. Hakim and A. Haque, “Effects of Neglecting Carrier Tunneling on Electrostatic Potential in Calculating Direct Tunneling Gate Current in Deep Submicron MOSFETs,” *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 49, no. 9, pp. 1669–1671, 2002. [26](#)
- [25] P. Palestri, N. Barin, D. Brunel, C. Busseret, A. Campera, P. A. Childs, F. Driussi, C. Fiegna, G. Fiori, R. Gusmeroli, G. Iannaccone, M. Karner, H. Kosina, A. L. Lacaita, E. Langer, B. Majkusiak, C. M. Compagnoni, A. Poncet, E. Sangiorgi, L. Selmi, A. S. Spinelli, and J. Walczak, “Comparison of Modeling Approaches for the Capacitance-Voltage and Current-Voltage Characteristics of Advanced Gate Stacks,” *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 54, no. 1, pp. 106–114, 2007. [26](#)
- [26] R. Clerc, “Etude des effets quantiques dans les composants CMOS à oxydes de grille ultra minces - Modélisation et caractérisation,” Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2001. [28](#)
- [27] M. DeMichielis, “Modelling and Optimization of Carrier Transport in Nanoscale MOSFETs,” Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble et Università degli Studi di Udine, 2009. [28](#), [30](#)
- [28] G. Fishman, *Energie et fonction d’onde des semi-conducteurs*. Les Editions de Physique, 1988. [28](#)
- [29] C. Kittel, *Physique de l’Etat Solide*. Dunod, 1998. [29](#)
- [30] T. Guillaume, “Influence des contraintes mécaniques non-intentionnelles sur les performances des transistors MOS à canaux ultra-courts,” Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2005. [32](#)
- [31] M. DeMichielis, D. Esseni, Y. L. Tsang, P. Palestri, L. Selmi, A. G. O’Neill, and S. Chattopadhyay, “A Semianalytical Description of the Hole Band Structure in Inversion Layers for the Physically Based Modeling of pMOS Transistors,” *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 54, no. 9, pp. 2164–2173, 2007. [32](#), [34](#), [48](#)
- [32] M. DeMichielis, D. Esseni, P. Palestri, and L. Selmi, “A New Analytical Model for the Energy Dispersion in Two-Dimensional Hole Inversion Layer,” *Solid-State Electronics*, vol. 51, no. 9, pp. 598–603, 2007. [33](#)
- [33] J. P. Colinge, J. C. Alderman, W. Xiong, and C. R. Cleavelin, “Quantum-Mechanical Effects in Trigate SOI MOSFETs,” *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 53, no. 5, pp. 1131–1136, 2006. [35](#)
- [34] S. Subramanian, “A Self-Consistent Solution of One-Dimensional Schrödinger-Poisson Equations by Newton-Raphson Iteration Technique,” *3rd International Workshop on Computational Electronics (IWCE)*, 1994, pp. 211–214. [36](#)

- [35] A. Trellakis, A. T. Galick, A. Pacelli, and U. Ravaioli, “Iteration Scheme for the Solution of the Two-Dimensional Schrödinger-Poisson Equations in Quantum Structures,” *Journal of Applied Physics*, vol. 81, no. 12, pp. 7880–7884, 1997. [36](#)
- [36] H. Wang, G. Wang, S. Chang, and Q. Huang, “Accelerated Solution of Poisson-Schrodinger Equations in Nanoscale Devices by Anderson Mixing Scheme,” *Micro & Nano Letters*, vol. 4, no. 2, pp. 122–127, 2009. [36](#)
- [37] J. Coignus, C. Leroux, R. Clerc, R. Truche, G. Ghibaudo, G. Reimbold, and F. Boulanger, “HfO<sub>2</sub>-based Gate Stacks Transport Mechanisms and Parameter Extraction,” *Solid-State Electronics*, vol. 54, pp. 972 – 978, 2010. [42](#)
- [38] R. Clerc, G. Ghibaudo, and G. Pananakakis, “Bardeen’s Approach for Tunneling Evaluation in MOS Structures,” *Solid-State Electronics*, vol. 46, pp. 1039–1044, 2002. [43](#)





# Etude de la conduction dans un empilement nMOS HfO<sub>2</sub>

---

Comme abordé dans l'introduction, l'étude du courant de grille  $I_g$  dans un empilement high- $\kappa$  — habituellement un bi-couche SiO<sub>2</sub> - high- $\kappa$  — doit répondre à deux enjeux majeurs :

1. **Approfondir la connaissance de ces empilements avancés.**

L'introduction des diélectriques high- $\kappa$ , moins connus que le SiO<sub>2</sub>, pose en effet des questions, telles que les mécanismes de conduction privilégiés dans ces diélectriques (tunnel direct, thermiquement assisté, assisté par pièges...) ainsi que leurs paramètres intrinsèques (masses tunnel, gaps et hauteurs de barrière par rapport au Silicium) [1, 2]. De plus, les contraintes liées à leur intégration, notamment la présence d'un oxyde interfacial SiO<sub>2</sub>, sont également susceptibles d'avoir un impact non négligeable sur le courant de fuite. L'oxyde interfacial pouvant présenter un comportement différent du SiO<sub>2</sub> pur [3], nous le noterons dans la suite de ce manuscrit IL (pour *Interfacial Layer*).

2. **Développer une modélisation prédictive du courant de grille.**

Un outil prédictif est nécessaire pour identifier les matériaux à même de répondre aux spécifications de l'ITRS en terme d'EOT et de fuites de grille [4]. La modélisation mise en place doit répondre à des exigences de 1/ précision (modélisation "physique" sans paramètres empiriques d'ajustement), 2/ souplesse (considération de divers diélectriques) et 3/ rapidité (modélisation analytique ou peu coûteuse en temps de calcul). Les travaux menés dans le cadre de cette thèse n'ont pas la prétention de modéliser et prédire le courant de grille d'un dispositif avancé en régime de fonctionnement : les fuites liées au recouvrement (*overlap*) de la grille et des source-drain ne sont pas prises en compte, ainsi que les fuites de grille à l'état *on* sous polarisation de drain  $V_d$ . Les méthodes de caractérisation et les modèles développés sont uniquement dédiés à l'étude de l'empilement.

Parmi le grand nombre de matériaux haute-permittivité candidats pour succéder au SiO<sub>2</sub> massif, les diélectriques à base d'Hafnium (en particulier HfO<sub>2</sub>) présentent de multiples avantages [5, 6, 7, 8] (stabilité thermique durant le process, gap et permittivité élevés, bonne maîtrise des techniques de dépôt...) et sont d'ores et déjà introduits au sein de composants ou circuits en production [9]. Ce chapitre s'appuie sur une étude complète d'empilements HfO<sub>2</sub> pour modéliser le courant de grille dans ces empilements et définir une méthodologie précise d'extraction de paramètres.



### Chapitre 3. Etude de la conduction dans un empilement nMOS HfO<sub>2</sub>

---

Dans une première partie, nous étudierons les mécanismes à l'origine de la conduction en régimes d'inversion et d'accumulation nMOS (types de porteurs assurant le transport, courant grille  $\rightarrow$  substrat ou substrat  $\rightarrow$  grille...) grâce à des données expérimentales obtenues sur des empilements IL - HfO<sub>2</sub> - TiN. Les divers mécanismes de conduction susceptibles d'être à l'origine du courant seront également introduits.

La seconde partie présente la modélisation tunnel employée pour expliquer la conduction électrique dans les différents régimes de fonctionnement. Couplés à la simulation Poisson-Schrödinger pour la description de la charge dans le substrat, différents modèles de transport dans l'empilement sont présentés, différant par leur rapidité d'exécution et leur précision (modèles analytiques ou numériques).

La validité de la comparaison entre courant de grille expérimental et théorie tunnel est ensuite abordée dans une troisième partie. Un ensemble complet de caractéristiques  $I_g(V_g)$  expérimentales est présenté, réalisé :

- pour différentes températures ( $80 \rightarrow 400\text{K}$ ),
- pour des empilements présentant des variantes d'épaisseur d'oxyde interfacial ( $t_{\text{IL}}$ ) et de HfO<sub>2</sub> ( $t_{\text{HfO}_2}$ ).

Les quatrième et cinquième parties comparent les caractéristiques à basse température à la théorie tunnel, permettant ainsi l'extraction des paramètres HfO<sub>2</sub> et l'étude de l'oxyde interfacial. L'importance de la connaissance de la structure de bande d'un diélectrique est notamment soulignée, et la sixième partie propose un regard critique sur les structures de bande extraites à partir des caractéristiques électriques.

Enfin, la septième et dernière partie commente le cas particulier du mécanisme de conduction Fowler-Nordheim dans HfO<sub>2</sub>.

## 1. Mécanismes à l'origine du courant de grille

### 1 Mécanismes à l'origine du courant de grille

#### 1.1 Technique de séparation de porteurs

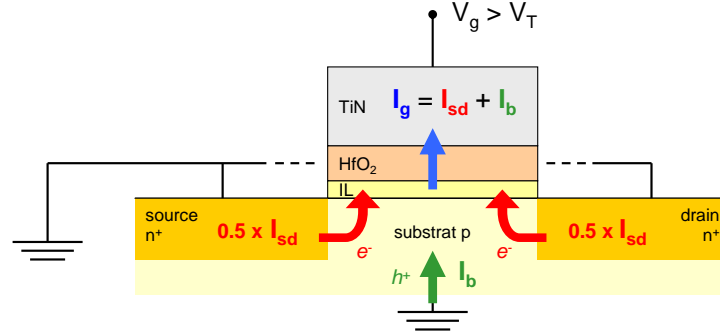


FIGURE 3.1 – Origine du courant de grille d'un transistor nMOS bulk avec empilement high- $\kappa$ , pour une polarisation  $V_g > V_T$ . Le courant de grille total résulte de la contribution des électrons provenant des source et drain et des trous du substrat p.

Le courant de grille  $I_g$  d'un transistor nMOS est dû au transport de porteurs du canal, alimenté par des réservoirs d'électrons (source et drain) et de trous (substrat), comme schématisé dans la Figure 3.1. Appliquer la loi de Kirchhoff de conservation des courants permet d'écrire pour tout régime de fonctionnement :

$$I_g = I_{sd} + I_b, \quad (3.1)$$

où  $I_{sd}$  est le courant d'électrons provenant des source-drain et  $I_b$  le courant de substrat.

La mesure conjointe des courants  $I_g$ ,  $I_{sd}$  et  $I_b$  pour différentes polarisations de grille  $V_g$  est appelée technique de séparation de porteurs [10, 11, 12, 13]. Elle permet d'identifier les courants à l'origine du courant de grille total. La Figure 3.2 décrit ces différentes contributions en fonction du régime de fonctionnement de la structure nMOS caractérisée.

1. Pour  $V_g > V_T$ , le courant de grille est la somme de 2 contributions :
  - $J2D_{BCe}$  : courant d'électrons confinés provenant de la couche d'inversion (gaz 2D). Ces électrons sont fournis par la source et le drain du transistor et, dans ce cas,  $I_{sd} = J2D_{BCe}$ ,
  - $J3D_{BVe}$  : courant d'électrons non-confinés de la bande de valence du substrat (gaz 3D). Pour chaque électron transitant vers la grille, une paire électron-trou est créée et les trous ainsi générés sont collectés dans le substrat. On a donc  $I_b = J3D_{BVe}$ .
2. Pour  $V_g < V_{FB}$ , le courant de grille est la somme des contributions :
  - $J3D_{METe}$  : courant d'électrons de la grille métallique (gaz 3D) vers la bande de conduction du Silicium,

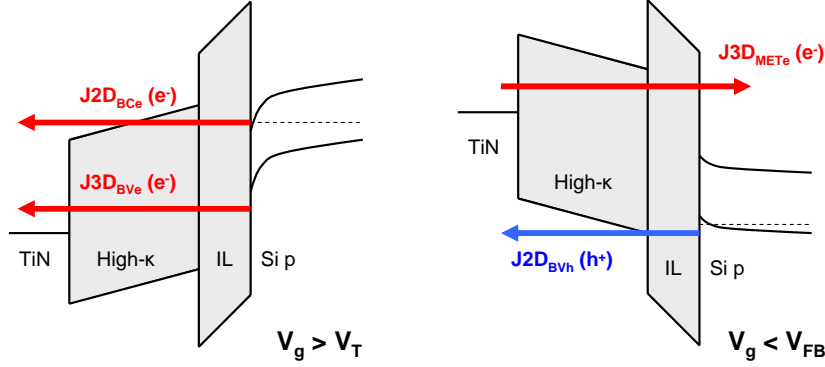


FIGURE 3.2 – Représentation des différentes contributions au courant de grille en fonction de la polarisation  $V_g$ . La nomenclature retenue pour désigner ces contributions est  $J$  / nature du gaz incident / origine des porteurs (bandes de conduction, de valence ou métal de grille) / type de porteurs.

- $J2D_{BVh}$  : courant de trous de la couche d'accumulation (gaz 2D) vers la grille métallique.

Dans ce cas, il est difficile de conclure sur la nature des courants  $I_{sd}$  et  $I_b$  mesurés. Les électrons transitant par  $J3D_{METe}$  peuvent en effet soit être évacués par les source-drain (courant  $I_{sd}$ ), soit se recombiner en profondeur du substrat et être détectés par mesure du courant  $I_b$ . Le courant  $J2D_{BVh}$  contribue quant à lui uniquement au courant  $I_b$  mesuré.

Les résultats expérimentaux obtenus lors de l'analyse de séparation de porteurs sur des empilements SiO<sub>2</sub> - TiN et SiO<sub>2</sub> - HfO<sub>2</sub> - TiN sont représentés en Figure 3.3. Les mesures  $I_g(V_g)$  représentées sont caractéristiques de l'ensemble des observations que nous avons pu faire sur ce type d'empilements, et permettent ainsi de généraliser les analyses expérimentales suivantes :

#### 1. Cas SiO<sub>2</sub> - métal.

Pour  $V_g > 0$ , le courant de grille  $I_g$  est égal au courant source-drain  $I_{sd}$  à faible champ, et à la somme des contributions des source-drain et du substrat (courant  $I_b$ ) à fort champ. La simulation du courant de grille en inversion nMOS nécessite donc la modélisation conjointe du courant 2D d'électrons de la bande de conduction  $J2D_{BCe}$  et du courant 3D d'électrons de la bande de valence  $J3D_{BVe}$ .

#### 2. Cas IL - high- $\kappa$ - métal.

Pour  $V_g > 0$ , le courant de grille  $I_g$  est égal au courant source-drain  $I_{sd}$  et seule la modélisation de la composante  $J2D_{BCe}$  est nécessaire pour simuler le courant de grille en inversion. Le courant d'électrons 3D de la bande de valence est en effet négligeable.

Pour  $V_g < 0$ , dans les 2 types de structure, le courant de grille est égal au courant

## 1. Mécanismes à l'origine du courant de grille

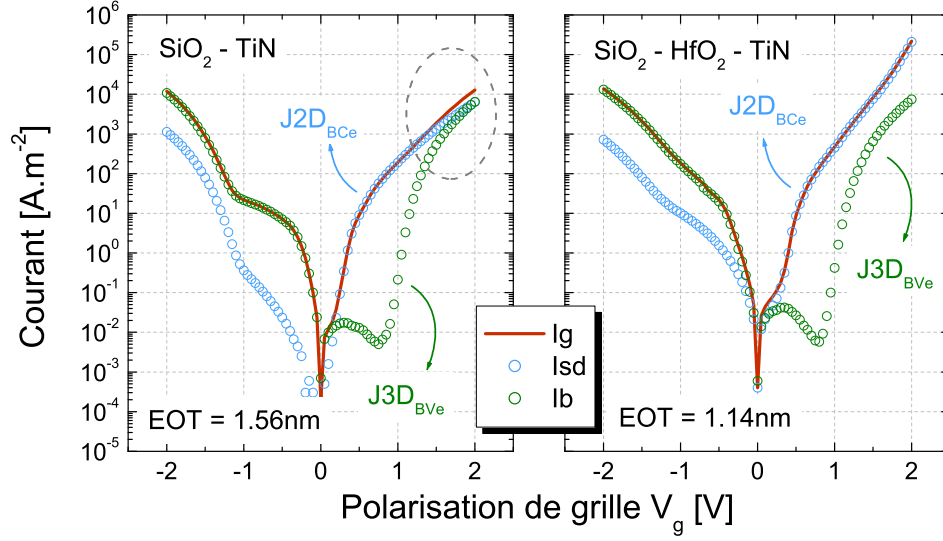


FIGURE 3.3 – Caractéristiques  $I_g(V_g)$  expérimentales et mesures de séparation de porteurs mesurées pour un empilement 15Å  $\text{SiO}_2$  - TiN et un empilement 8Å IL - 20Å  $\text{HfO}_2$  - TiN ( $T = 300\text{K}$ ).

de substrat  $I_b$  et le courant  $I_{sd}$  est négligeable. Néanmoins, il n'est pas possible de conclure quant à l'origine du courant de grille, le courant  $I_b$  pouvant indifféremment être égal aux composantes  $J3D_{\text{METe}}$  ou  $J2D_{\text{BVh}}$ . Expérimentalement, il n'est donc pas possible de conclure sur la nature du courant en accumulation nMOS et la technique de séparation de porteurs montre ses limites. Seule la modélisation de ces 2 contributions et leur comparaison avec l'expérience permettra de conclure sur la nature du courant de grille à  $V_g < 0$  (cf. paragraphe 5.1, page 5.1).

Enfin, notons que l'analyse de la séparation de porteurs dans un empilement standard  $\text{SiO}_2$  - Polysilicium montre la même tendance qu'un empilement high- $\kappa$ , à savoir  $I_g = I_{sd} = J2D_{\text{BCe}}$  pour  $V_g > 0$  et  $I_g = I_b$  pour  $V_g < 0$ . L'analyse, identique à celle d'un empilement IL - high- $\kappa$  - métal, n'est pas détaillée par souci de clarté.

Le Tableau 3.1 résume les résultats obtenus par technique de séparation de porteurs pour les différents empilements cités.

Empilement	$V_g > V_T$	$V_g < V_{\text{FB}}$
$\text{SiO}_2$ - Polysilicium	$I_g = I_{sd} = J2D_{\text{BCe}}$	$I_g = I_b = ?$
$\text{SiO}_2$ - métal	$I_g = I_{sd} + I_b = J2D_{\text{BCe}} + J3D_{\text{BVe}}$	$I_g = I_b = ?$
<b>IL - high-<math>\kappa</math> - métal</b>	$I_g = I_{sd} = J2D_{\text{BCe}}$	$I_g = I_b = ?$

TABLEAU 3.1 – Origine du courant de grille dans différents types d'empilements.

## 1.2 Mécanismes de transport dans un diélectrique

Les composantes  $J2D_{BCE}$ ,  $J3D_{BVe}$ ,  $J3D_{METe}$  et  $J2D_{BVh}$  peuvent être portées par différents mécanismes de conduction, principalement de type tunnel ou assistés par des pièges localisés dans le gap des diélectriques (pour les épaisseurs considérées). L'identification de ces mécanismes est possible :

- expérimentalement : en utilisant différents leviers permettant de discriminer chaque contribution, tels que la température de mesure ou l'épaisseur des diélectriques caractérisés,
- théoriquement : en comparant différents modèles de conduction au courant de grille expérimental.

Pour plus de clarté, ce paragraphe résume les principaux mécanismes de conduction d'électrons à travers un empilement MIM (métal - isolant - métal). Nous retrouverons les mêmes mécanismes lors de l'étude du courant dans un empilement Silicium - IL - high- $\kappa$  - métal.

### 1.2.1 Conduction tunnel

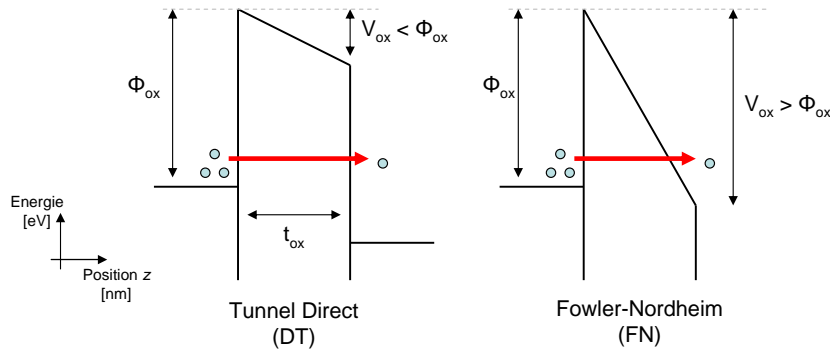


FIGURE 3.4 – Schéma simplifié des mécanismes de conduction assistés par champ dans un diélectrique.

Les fonctions d'onde des porteurs provenant de la cathode émettrice pénètrent dans le diélectrique et induisent une probabilité de présence non nulle de charges au sein de la barrière de potentiel. Ce phénomène, dû à la nature quantique des porteurs, permet le passage d'un courant appelé courant tunnel [14].

Le transport est d'autant plus favorisé que le diélectrique est soumis à un champ électrique important  $E_{ox} = V_{ox}/t_{ox}$  avec  $V_{ox}$  la chute de potentiel dans l'oxyde et  $t_{ox}$  son épaisseur. La Figure 3.4 schématise les 2 cas particuliers de transitions tunnel dans un diélectrique :

- Le transport Tunnel Direct (noté TD) est une transition isoénergétique d'un

## 1. Mécanismes à l'origine du courant de grille

porteur d'énergie incidente  $E$ <sup>1</sup> et est assistée par le champ électrique dans le diélectrique. Exponentiellement dépendante de l'épaisseur de la barrière, elle est la transition prépondérante pour des oxydes ultra-minces [15]. Elle intervient pour des porteurs d'énergie  $E < \phi_{\text{ox}} - V_{\text{ox}}$ , avec  $\phi_{\text{ox}}$  la hauteur de barrière du diélectrique par rapport au niveau de Fermi du métal émetteur.

- A fort champ ou pour une épaisseur  $t_{\text{ox}}$  importante, la chute de potentiel  $V_{\text{ox}}$  est susceptible d'être du même ordre de grandeur que  $\phi_{\text{ox}} - E$ . La barrière est alors triangulaire et les porteurs transitent par effet tunnel dans la bande de conduction du diélectrique à travers une épaisseur  $t < t_{\text{ox}}$  [16]. Cet effet est appelé transition Fowler-Nordheim (notée FN) et intervient donc pour  $\phi_{\text{ox}} - V_{\text{ox}} < E < \phi_{\text{ox}}$ .

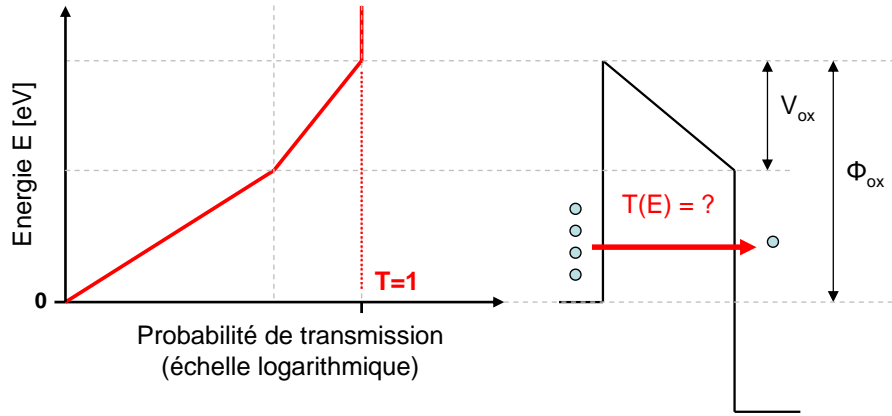


FIGURE 3.5 – Probabilité de transmission tunnel  $T$  d'un porteur d'énergie incidente  $E$  à travers une couche diélectrique sous potentiel  $V_{\text{ox}}$ .

La probabilité de transmission d'un porteur (également appelée transparence) est notée  $T$  et est fonction de l'énergie incidente du porteur considéré. Elle s'échelonne entre 0 (transparence nulle) et 1 (transparence totale). La Figure 3.5 introduit cette notion en regard d'une structure MIM sous potentiel  $V_{\text{ox}}$ . La transparence atteint ses valeurs les plus importantes quand l'énergie du porteur est supérieure à la hauteur de barrière du diélectrique ( $E > \phi_{\text{ox}}$ ). On parle alors d'émission thermoionique (notée TI) : dans ce cas, le transport est en général considéré ballistique dans la bande de conduction des diélectriques. Dans le  $\text{SiO}_2$ , le libre parcours moyen des porteurs est de l'ordre de 4 nanomètres [17, 18]. Nous ferons la même hypothèse dans le cas du  $\text{HfO}_2$ , à savoir un transport ballistique dans la bande de conduction.

1. Dans l'empilement MIM cité ici en exemple, la référence  $E = 0 \text{ eV}$  est prise égale au niveau de Fermi du métal émetteur.

### Dépendance du courant tunnel avec la température

Le transport tunnel dans un diélectrique (qu'il soit Direct ou de type Fowler-Nordheim) ne montre qu'une dépendance limitée avec la température [19]. Les mécanismes quantiques en jeu dans le calcul de la transparence sont en effet uniquement fonctions de l'énergie du porteur considéré et de l'énergie potentielle de la structure dans laquelle il évolue. Ces notions seront détaillées dans le paragraphe 2 de ce chapitre.

Néanmoins, la distribution énergétique de charge dans la cathode émettrice présente une dépendance thermique (statistique de Fermi-Dirac) : à basse température, les porteurs sont moins énergétiques et le courant tunnel global présentera donc une certaine dépendance thermique.

#### 1.2.2 Conduction assistée par pièges

Des défauts structuraux ou des impuretés dans une couche diélectrique peuvent induire des pièges localisés dans le gap du matériau. Un piège est susceptible de capturer ou d'émettre un porteur, et permet ainsi d'assister le transport à travers l'empilement diélectrique. Nous présentons ici le cas d'un transport assisté par un unique piège coulombien d'énergie  $E_t$  (les concepts abordés pouvant néanmoins s'étendre à une conduction de pièges en pièges). L'écart énergétique entre  $E_t$  et la bande de conduction du diélectrique est noté  $\phi_t$ .

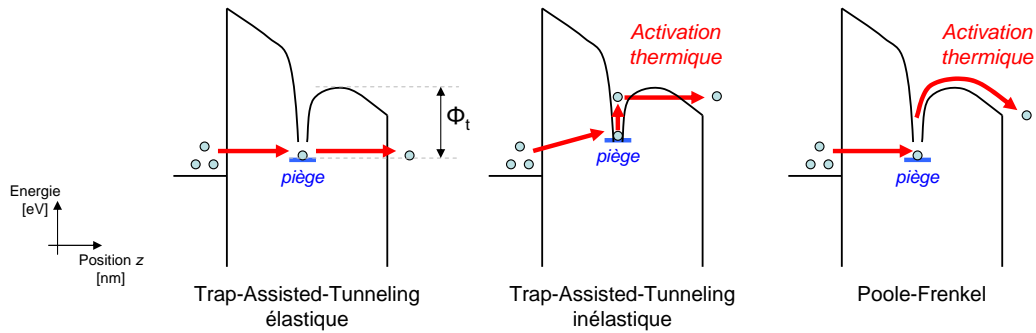


FIGURE 3.6 – Schéma simplifié des mécanismes de conduction assistés par pièges dans un diélectrique.

La Figure 3.6 distingue 3 types de transition :

- A très basse température ou pour des pièges profonds (faible énergie  $E_t$ ), les mécanismes de capture depuis le milieu émetteur ou d'émission vers le matériau récepteur sont de type tunnel (DT ou FN). On dit alors que le phénomène de transition tunnel est isoénergétique et assisté par piège (*Trap-Assisted-Tunneling*, noté TAT élastique) [20, 21].
- Pour une température non-nulle, un porteur transitant dans l'empilement peut

## 1. Mécanismes à l'origine du courant de grille

---

capturer un phonon du réseau. Ce gain en énergie peut alors 1/ favoriser la capture par un piège situé à une énergie supérieure, ou 2/ favoriser l'émission depuis un piège en augmentant la transparence de la barrière de hauteur  $\phi_t$ , modulée en fonction de l'activation thermique du porteur piégé et donc de son énergie. On parle de transport TAT inélastique, composante fortement activée en température [22].

- A haute température, ou pour des pièges peu profonds, le gain en énergie lié à la capture d'un phonon peut être supérieur à la hauteur de barrière  $\phi_t$  et donc permettre une transition thermoïonique du porteur dans la bande de conduction du diélectrique. On parle de courant de type Poole-Frenkel (PF), cas particulier du transport TAT inélastique pour lequel  $T_{\text{barrière}} = 1$  [23].



## 2 Modélisation du courant tunnel

Pour les nœuds technologiques antérieurs au nœud 65nm, les empilements Silicium - oxyde natif de Silicium - Polysilicium présentaient une excellente intégrité structurale, une bonne stabilité thermique, résultant en un diélectrique de grille SiO<sub>2</sub> pauvre en pièges. De nombreuses études ont ainsi montré que dans des gammes d'épaisseurs inférieures à environ 3 nm, la composante tunnel dans un oxyde SiO<sub>2</sub> est le mécanisme de conduction prépondérant et explique le courant de grille total observé [24, 25].

Par rapport à ces empilements conventionnels, l'introduction de nouveaux matériaux dans l'empilement (diélectriques high- $\kappa$  et métaux de grille) induit :

- une épaisseur physique de l'empilement diélectrique plus importante à EOT constant,
- d'importantes transitions structurales aux différentes interfaces et des procédés de dépôts différents pouvant potentiellement induire une importante concentration de pièges dans les diélectriques.

Au vu de ces deux éléments, le courant de grille dans un empilement high- $\kappa$  à température ambiante est donc susceptible de présenter une composante assistée par pièges supérieure à la composante tunnel, notamment pour des épaisseurs importantes de high- $\kappa$ . A basse température, nous attendons toutefois une baisse conséquente des composantes thermiquement activées, laissant place à un transport de type tunnel.

Nous présentons dans cette partie la simulation de courant tunnel développée au cours de cette thèse. Confrontée à l'expérience, elle permettra à terme de statuer sur le mode de transport privilégié dans 1/ un empilement SiO<sub>2</sub> (permettant d'asseoir ou contredire les conclusions de la littérature), et 2/ un empilement high- $\kappa$  - métal.

Nous avons choisi de suivre une approche basée sur la notion de transparence, approche la plus communément utilisée dans la littérature [26, 27, 28, 29] et qui présente l'avantage d'être la moins coûteuse en temps de calcul. Pour être complet, signalons les méthodes de Bardeen [30, 31], des résonances du coefficient de réflexion [25, 32, 33] ainsi que le formalisme des fonctions de Green [34] qui permettent également le calcul numérique du courant tunnel.

Nous présentons dans une première partie différentes méthodes de calcul de la transparence tunnel, incluant les composantes Tunnel Direct et Fowler-Nordheim. Les deuxième et troisième parties présentent le calcul du courant total de porteurs confinés (courant 2D) ou libres (courant 3D), permettant ainsi de modéliser les composantes  $J_{2D_{BCe}}$ ,  $J_{3D_{BVe}}$ ,  $J_{3D_{METe}}$  et  $J_{2D_{BVh}}$  du courant de grille. Pour simplifier, nous détaillerons uniquement la modélisation du transport d'électrons. Les notions abordées s'appliqueront de même à la modélisation du courant tunnel de trous.

## 2. Modélisation du courant tunnel

### 2.1 Modélisation de la transparence tunnel

En mécanique quantique, l'équation de Schrödinger unidimensionnelle appliquée à un porteur dans une structure d'énergie potentielle  $E_{\text{pot}}(z)$  admet toujours solution, y compris quand l'énergie du porteur est inférieure à l'énergie potentielle. Ainsi, la densité de probabilité de présence<sup>2</sup> est définie en tout point et est non nulle au sein d'une barrière de potentiel.

La Figure 3.7 illustre schématiquement le comportement de la fonction d'onde d'un porteur d'énergie  $E_{\text{porteur}}$  dans une structure échelon : quand  $E_{\text{porteur}} > E_{\text{pot}}$  la fonction d'onde est plane et progressive et devient évanescence quand  $E_{\text{porteur}} < E_{\text{pot}}$  dans une barrière de potentiel. L'évanescence de la fonction d'onde dans un diélectrique est caractéristique de la transparence tunnel  $T$  de la barrière.

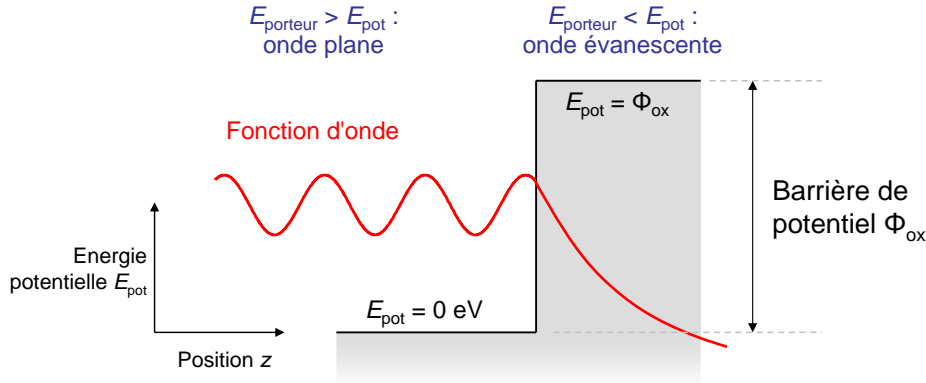


FIGURE 3.7 – Fonction d'onde d'un porteur d'énergie  $E_{\text{porteur}}$ , évoluant dans une structure échelon d'énergie potentielle  $E_{\text{pot}}$ .

#### 2.1.1 Cas d'école : transparence d'une barrière carrée

Nous décrivons ici les étapes nécessaires pour modéliser la transparence d'une barrière carrée. Ce cas d'école présente de manière claire les hypothèses posées et permettra d'étendre les notions abordées à la transparence d'une double barrière de potentiel IL - high- $\kappa$  sous champ électrique.

Nous considérons la transition tunnel d'électrons d'énergie  $E$  dans une structure MIM, comme schématisé Figure 3.8. La référence d'énergie  $E = 0 \text{ eV}$  est prise égale aux niveaux de Fermi des métaux (matériaux 1 et 3), considérés identiques. La barrière de potentiel qui les sépare est d'épaisseur  $t_{\text{ox}}$  et de hauteur  $\phi_{\text{ox}}$  (matériau 2). La densité de courant traversant la structure se décompose en différentes contributions, appelées densités de courant de probabilité de présence (que nous appellerons *courants* par commodité) :

2. On rappelle qu'elle est donnée par le module carré de la fonction d'onde, solution de l'équation de Schrödinger.

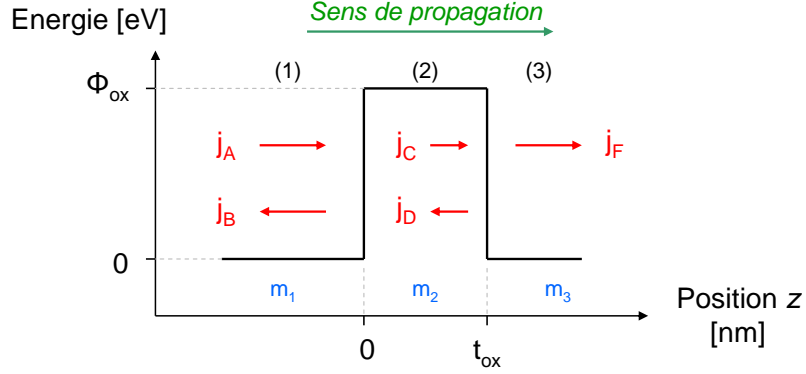


FIGURE 3.8 – Schéma de la structure MIM considérée.

- dans le milieu 1 (métal émetteur), le courant incident est noté  $j_A(E)$  (électrons se propageant suivant les  $z$  positifs) et  $j_B(E)$  est la composante réfléchie à l'interface avec la barrière (électrons se propageant suivant les  $z$  négatifs),
- de même, les courants tunnel  $j_C(E)$  et  $j_D(E)$  se propagent respectivement suivant les  $z$  positifs ou négatifs au sein de la barrière de potentiel,
- enfin, le courant  $j_F(E)$  est l'unique composante résultant de la transmission du courant  $j_C(E)$  dans le milieu 3 (métal récepteur).

La transparence tunnel de la barrière  $T(E)$  est donnée par le rapport entre le courant sortant et le courant incident :

$$T(E) = \frac{j_F(E)}{j_A(E)}, \quad (3.2)$$

et équivaut à la probabilité qu'un électron d'énergie  $E$  traverse la barrière.

Les densités de courant de probabilité sont obtenues en résolvant l'équation de Schrödinger. Dans l'approximation de la masse effective, le vecteur d'onde  $\vec{k}$  des porteurs incidents peut être séparé en une composante  $\vec{k}_z$  (contribution au mouvement des électrons suivant  $z$ ) et  $\vec{k}_{//} = \vec{k}_x + \vec{k}_y$  (contribution au mouvement dans le plan parallèle). L'énergie potentielle n'est pas invariante suivant  $z$  : dans cette approche, le transport tunnel ne conserve donc pas la composante  $\vec{k}_z$ , mais conserve la composante  $\vec{k}_{//}$ .

Suivant l'approche décrite dans le chapitre 2 (Equation 2.10, page 30), les solutions générales de l'équation de Schrödinger dans les 3 matériaux sont :

$$\begin{aligned} \varphi_1(z) &= Ae^{ik_1z} + Be^{-ik_1z}, \\ \varphi_2(z) &= Ce^{ik_2z} + De^{-ik_2z}, \\ \varphi_3(z) &= Fe^{ik_3z} \end{aligned} \quad (3.3)$$

où A, B, C, D et F sont des constantes et  $k_{1..3}$  les vecteurs d'onde dans les matériaux 1, 2 et 3. Chaque fonction d'onde solution est assimilable à la somme de 2 ondes

## 2. Modélisation du courant tunnel

---

planes se propageant dans des sens opposés, qui correspondent aux courants évoqués précédemment. En considérant une description parabolique des bandes d'énergie, les vecteurs d'onde s'écrivent :

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - E_{\text{pot}})}, \quad (3.4)$$

avec  $m$  la masse effective<sup>3</sup> des porteurs, différente dans chaque matériau. Dans les métaux 1 et 3,  $E - E_{\text{pot}} = E > 0$ ,  $k_1$  et  $k_3$  sont des grandeurs réelles, et les fonctions d'onde sont des ondes planes. Dans la barrière de potentiel,  $E - E_{\text{pot}} = E - \phi_{\text{ox}} < 0$ ,  $k_2$  est imaginaire, et les fonctions d'onde sont des exponentielles croissantes ou décroissantes.

L'opérateur de densité de courant de probabilité est donné par :

$$j = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left( \bar{\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right), \quad (3.5)$$

et, appliqué aux Equations 3.2 et 3.3, permet d'exprimer la transparence tunnel :

$$T(E) = \frac{k_3(E)}{k_1(E)} \frac{m_1}{m_3} \left| \frac{F}{A} \right|^2 \quad (3.6)$$

Les coefficients A et F sont obtenus en résolvant les équations de passage aux différentes interfaces qui garantissent la continuité des fonctions d'onde et des densités de courant de probabilité. Dans le cas où les porteurs à l'origine de la conduction ont une énergie  $E < \phi_{\text{ox}}$  dans la barrière de potentiel, nous faisons l'approximation  $e^{2ik_2(E)t_{\text{ox}}} \ll e^{-2ik_2(E)t_{\text{ox}}}$ . Ainsi, la transparence tunnel de la barrière carrée s'écrit :

$$T(E) = \frac{4 v_1(E) v_2(E)}{v_1(E)^2 + v_2(E)^2} \cdot \frac{4 v_2(E) v_3(E)}{v_2(E)^2 + v_3(E)^2} \cdot e^{2ik_2(E)t_{\text{ox}}}, \quad (3.7)$$

avec  $v_1(E)$ ,  $v_2(E)$  et  $v_3(E)$  les vitesses thermiques dans chaque zone, s'exprimant en fonction du vecteur d'onde :  $v = \hbar k / m$ .

L'observation de l'Equation 3.7 permet quelques remarques :

- Le terme exponentiel est caractéristique du transport dans la barrière : on remarque ainsi l'importante dépendance de la transparence avec l'épaisseur  $t_{\text{ox}}$ , ainsi qu'avec les paramètres tunnel de la barrière :  $\phi_{\text{ox}}$  et  $m_2$ .
- Les 2 termes précédant le terme exponentiel sont caractéristiques des réflexions des fonctions d'onde aux 2 interfaces : ils s'annulent si on considère  $B = D = 0$ . Fonctions des paramètres des matériaux émetteurs et récepteurs, ils ne jouent néanmoins qu'un rôle limité dans la transparence, l'influence des paramètres tunnel (terme exponentiel) étant prépondérante.

Pour calculer la transparence tunnel d'une double barrière de potentiel sous champ électrique, la même méthodologie est appliquée : résolution de l'équation de

---

3.  $m$  est également appelée *masse tunnel* par abus de langage.

Schrödinger dans chaque matériau et résolution des équations de continuité aux interfaces. La démonstration faite ici s'appuie sur les solutions analytiques de l'équation de Schrödinger dans une zone où  $E_{\text{pot}} = \text{cte}$ . En pratique, les barrières de potentiel dans une structure MOS sont trapézoïdales à cause du champ électrique imposé par la grille : le cas d'école que nous venons de présenter ne permet donc pas de modéliser directement la transparence d'un empilement diélectrique high- $\kappa$ .

Nous présentons maintenant différentes méthodes de calcul de la transparence tunnel d'une double barrière de potentiel IL - high- $\kappa$  trapézoïdale. Les paramètres de l'empilement considérés dans la suite du manuscrit sont définis dans la Figure 3.9. Nous considérons uniquement le courant tunnel d'électrons de la bande de conduction du Silicium (régime d'inversion nMOS) : les paramètres de l'empilement diélectrique (masses tunnel et hauteurs de barrière) sont donc spécifiques à ce type de porteurs.

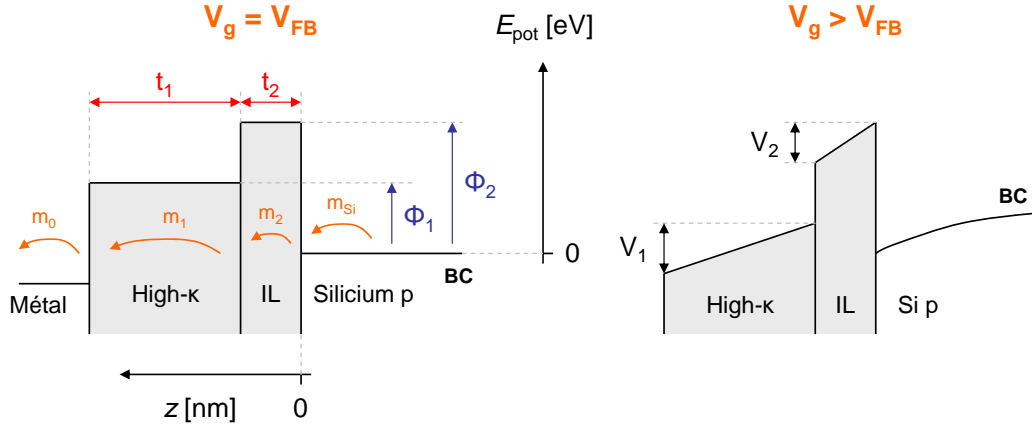


FIGURE 3.9 – Définition des paramètres d'un empilement Si - IL - high- $\kappa$  - métal nécessaires à la modélisation de la transparence tunnel.

### 2.1.2 Formalisme des fonctions d'Airy

Nous présentons dans un premier temps la modélisation "exacte" de la transparence d'un double empilement de barrières trapézoïdales. Sous champ électrique constant, l'énergie potentielle dans l'oxyde interfacial (barrière 2) s'écrit  $E_{\text{pot}}(z) = \phi_2 - (V_2/t_2) \cdot z$  et l'équation de Schrödinger à résoudre est de la forme  $y'' - xy = 0$ <sup>4</sup>. Les solutions de cette équation différentielle sont les fonctions d'Airy, notées Ai et Bi [35].

Une fois connues les solutions des équations de Schrödinger dans chaque matériau, les équations de passage permettent de calculer la transparence tunnel  $T_{\text{Airy}}(E)$

4. Il en est de même dans la barrière 1 (high- $\kappa$ ).

## 2. Modélisation du courant tunnel

[36, 37]. L'expression analytique de la transparence et sa démonstration ne sont pas détaillées dans ce paragraphe mais sont données dans l'Annexe B.

La relation  $T_{\text{Airy}}(E)$  d'un empilement 8Å SiO<sub>2</sub> - 20Å HfO<sub>2</sub> est tracée Figure 3.10. Cette relation présente des points d'inflexion (symbolisés par une pastille jaune) qui sont caractéristiques des transitions entre conduction Tunnel Direct (TD), Fowler-Nordheim (FN) ou thermoïonique (TI) dans les 2 diélectriques. Les mécanismes de conduction en jeu sont fonction de l'énergie incidente  $E$  des porteurs :

- $0 < E < \phi_1 - V_2 - V_1$  : conduction Tunnel Direct dans les 2 diélectriques,
- $\phi_1 - V_2 - V_1 < E < \phi_1 - V_2$  : conduction Tunnel Direct dans l'IL et Fowler-Nordheim dans le high- $\kappa$ ,
- $\phi_1 - V_2 < E < \phi_2 - V_2$  : conduction Tunnel Direct des porteurs à travers l'IL directement dans la bande de conduction du matériau high- $\kappa$ ,
- $\phi_2 - V_2 < E < \phi_2$  : conduction Fowler-Nordheim dans l'IL et thermoïonique dans le high- $\kappa$ ,
- $\phi_2 < E$  : injection thermoïonique dans les 2 diélectriques.

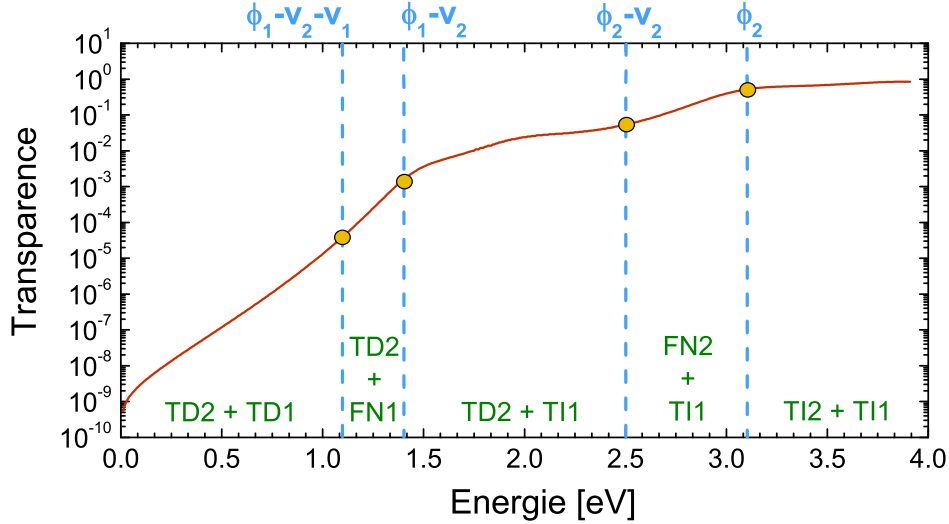


FIGURE 3.10 – Transparence d'un empilement 8Å SiO<sub>2</sub> - 20Å HfO<sub>2</sub> - TiN en fonction de l'énergie incidente  $E$  des électrons de la bande de conduction du Silicium. La double barrière de potentiel est soumise à un champ électrique conduisant à une chute de potentiel  $V_2 = 600\text{mV}$  dans l'IL et  $V_1 = 300\text{mV}$  dans le HfO<sub>2</sub>. Les paramètres tunnel considérés sont  $\phi_2 = 3,1\text{eV}$ ,  $\phi_1 = 2\text{eV}$ ,  $m_2 = 0,5m_0$  et  $m_1 = 0,2m_0$ .

Les fonctions d'Airy n'ont pas d'équivalentes analytiques plus simples et ne sont pas intégrées au sein des bibliothèques de fonctions standards utilisées dans les modèles compacts (BSIM [38] ou PSP [39]) ou divers outils de simulation numérique (Silvaco [40], Synopsys [41]). Cette méthode de calcul de la transparence, bien que considérée la plus proche de la solution exacte, requiert donc des alternatives, plus facilement intégrables dans une approche numérique.

### 2.1.3 Méthode WKB

La méthode Wentzel-Kramers-Brillouin permet le calcul quasi-classique de la transparence d'une barrière de potentiel quelconque. Ce formalisme développé en 1926 [42] repose sur l'idée que la mécanique quantique tend vers la mécanique classique quand  $\hbar$  tend vers 0. L'approche WKB consiste ainsi en une approximation semi-classique au premier ordre d'un problème quantique et a pour principal avantage le fait d'être analytique quel que soit  $E_{\text{pot}}(z)$ .

La condition nécessaire pour que cette approche soit applicable au calcul de la transparence est que l'énergie potentielle doit varier lentement à l'échelle de la longueur d'onde des porteurs incidents. Dans un empilement diélectrique, les interfaces sont considérées abruptes et l'énergie potentielle présente des discontinuités. Les fonctions d'onde sont alors en partie réfléchies par ces interfaces et la méthode WKB n'est pas à même d'en rendre compte [27]. La transparence WKB est donc uniquement fonction des paramètres de la barrière et pas des milieux voisins (substrat et grille).

La transparence de la double-barrière  $T_{\text{WKB,DB}}(E)$  peut s'écrire comme le produit des transparences de chaque barrière :

$$T_{\text{WKB,DB}}(E) = T_{\text{WKB,1}}(E) \cdot T_{\text{WKB,2}}(E) \quad (3.8)$$

Dans le formalisme WKB, la transparence de l'IL (barrière 2) est donnée par :

$$\begin{aligned} T_{\text{WKB,2}}(E) &= \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^{t_2} \sqrt{2m_2 (E_{\text{pot}}(z) - E)} dz\right) \\ &= \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^{t_2} \sqrt{2m_2 \left(\phi_2 - \frac{V_2}{t_2}z - E\right)} dz\right), \end{aligned} \quad (3.9)$$

et, de même :

$$T_{\text{WKB,1}}(E) = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{t_1}^{t_1+t_2} \sqrt{2m_1 \left(\phi_1 - V_2 - \frac{V_1}{t_1}z - E\right)} dz\right), \quad (3.10)$$

Cette approche analytique est uniquement valable pour une transition de type Tunnel Direct ( $0 < E < \phi - V$ ). La transition Fowler-Nordheim ( $\phi - V < E < \phi$ ) trouve également une formulation analytique suivant la même approche mais dans ce cas la limite d'intégration  $t$  est changée en  $t \cdot (\phi - E)/V$  pour tenir compte de l'amincissement de la barrière dû au champ électrique.

### 2.1.4 Méthode WKB avancée

Appliquée à la barrière du cas d'école présenté dans le paragraphe 2.1.1 (barrière carrée de paramètres  $t_{\text{ox}}$ ,  $m_2$ ,  $\phi_{\text{ox}}$  et de relation de dispersion  $k_2(E)$ ), l'approche WKB donne la relation  $T(E)$  suivante :

$$T_{\text{WKB}}(E) = e^{2ik_2(E)t_{\text{ox}}} \quad (3.11)$$

## 2. Modélisation du courant tunnel

---

qui est le terme caractéristique du transport dans la barrière dans l'Equation 3.7.

Il est ainsi possible de généraliser l'approche WKB en une approche WKB dite "avancée" : les bénéfices respectifs de l'approximation WKB (formulation analytique de la transparence quel que soit le champ électrique) et de la résolution de l'équation de Schrödinger dans l'empilement (prise en compte des réflexions) permettent d'écrire pour un empilement IL - high- $\kappa$  :

$$T_{\text{aWKB}}(E) = \prod_i T_{\text{c},i}(E) \cdot \prod_j T_{\text{WKB},j}(E), \quad (3.12)$$

avec  $T_{\text{WKB},j}(E)$  la transparence WKB de la barrière  $j$  (IL ou high- $\kappa$ ) et  $T_{\text{c},i}(E)$  un terme correctif corrigeant l'approche WKB conventionnelle de la réflexion des fonctions d'onde à une interface  $i$  entre 2 matériaux A et B :

$$T_{\text{c},i}(E) = \frac{4v_A(E)v_B(E)}{v_A(E)^2 + v_B(E)^2}, \quad (3.13)$$

avec  $v_A$  et  $v_B$  les vitesses thermiques dans les matériaux.

Cette correction du modèle WKB a été proposé en 1999 par Register et al. [27, 29] pour des empilements high- $\kappa$ , en ne corrigeant que les réflexions à l'interface Si - IL. Au cours de cette thèse, nous l'avons étendue à l'ensemble des interfaces de l'empilement. Nous rappelons que ce modèle n'est valable que pour des gammes d'énergie inférieures à l'énergie potentielle des diélectriques (approximation  $e^{2ik_{\text{ox}}t_{\text{ox}}} \ll e^{-2ik_{\text{ox}}t_{\text{ox}}}$ ) : le cas d'une barrière fortement trapézoïdale voire triangulaire (transition Fowler-Nordheim) n'est pas pris en compte.

Les méthodes WKB (conventionnelle et avancée) sont comparées à la transparence obtenue par le formalisme d'Airy dans la Figure 3.11. Le principal enseignement est que l'approximation WKB, méthode encore aujourd'hui la plus utilisée pour la modélisation prospective du courant de grille [43, 44, 45, 46], montre un écart important par rapport à la solution exacte. De même, l'approximation de Register négligeant la réflexion des fonctions d'onde aux interfaces IL - high- $\kappa$  et high- $\kappa$  - métal n'apparaît pas pertinente et induit une erreur de près de 50% par rapport à la solution exacte. Le courant tunnel étant directement proportionnel à la transparence, les écarts observés se retrouveront sur la modélisation : nous soulignons donc la nécessaire prise en compte de la réflexion des fonctions d'onde aux différentes interfaces pour toute modélisation précise de la transparence et donc du courant.

En effet, la méthode WKB avancée que nous proposons reproduit fidèlement la solution exacte à basses énergies, pour lesquelles les mécanismes de conduction sont de type Tunnel Direct dans les 2 diélectriques. L'erreur avec la transparence d'Airy devient maximale aux transitions TD - FN, conformément aux attentes.

### 2.1.5 Méthode des matrices de transfert

La méthode des matrices de transfert appliquée au calcul de la transparence tunnel a été proposée par Ando et al. en 1987 [47]. Il s'agit d'une approche numérique



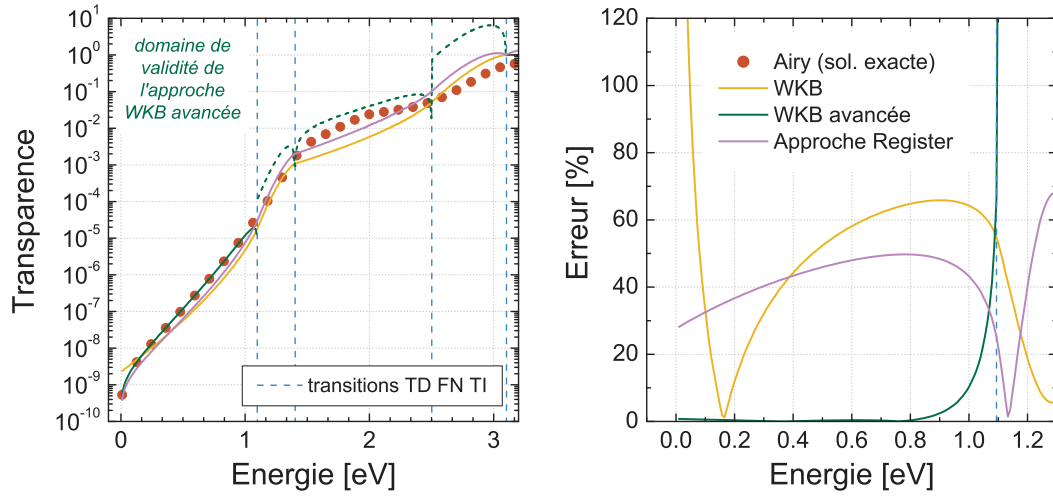


FIGURE 3.11 – Transparence d’un empilement 8Å SiO<sub>2</sub> - 20Å HfO<sub>2</sub> - TiN calculée suivant les approches Airy (solution exacte), WKB, WKB avancée (réflexion des fonctions d’onde à toutes les interfaces) et l’approximation de Register (prise en compte de la réflexion uniquement à l’interface Silicium - IL). Les paramètres de simulation sont identiques à ceux de la Figure 3.10.

consistant à discrétiser la barrière de potentiel en un nombre  $N$  de barrières carrées d’épaisseurs infinitésimales, comme schématisé sur la Figure 3.12. Les solutions de l’équation de Schrödinger dans chaque barrière carrée sont connues (cf. cas d’école, paragraphe 2.1.1), et la résolution des équations de passage est calculée par une approche matricielle (même méthodologie que le formalisme d’Airy).

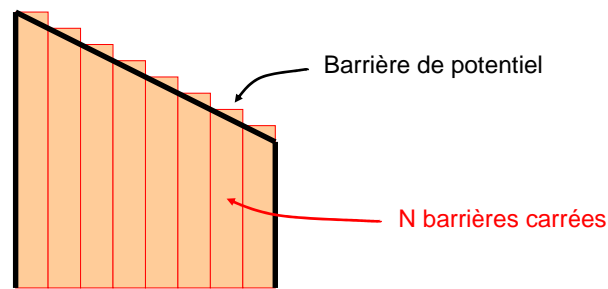


FIGURE 3.12 – Principe de discrétisation d’une barrière de potentiel quelconque en  $N$  barrières carrées (méthode des matrices de transfert).

La Figure 3.13 compare la transparence calculée selon la méthode des matrices de transfert avec la solution exacte. Nous constatons que l’erreur relative est d’autant plus faible que le nombre de points de maillage  $N$  est important. Pour un faible

## 2. Modélisation du courant tunnel

nombre  $N$  de barrières carrées, l'énergie potentielle moyenne de l'empilement est surestimée, conduisant à une transparence plus faible.

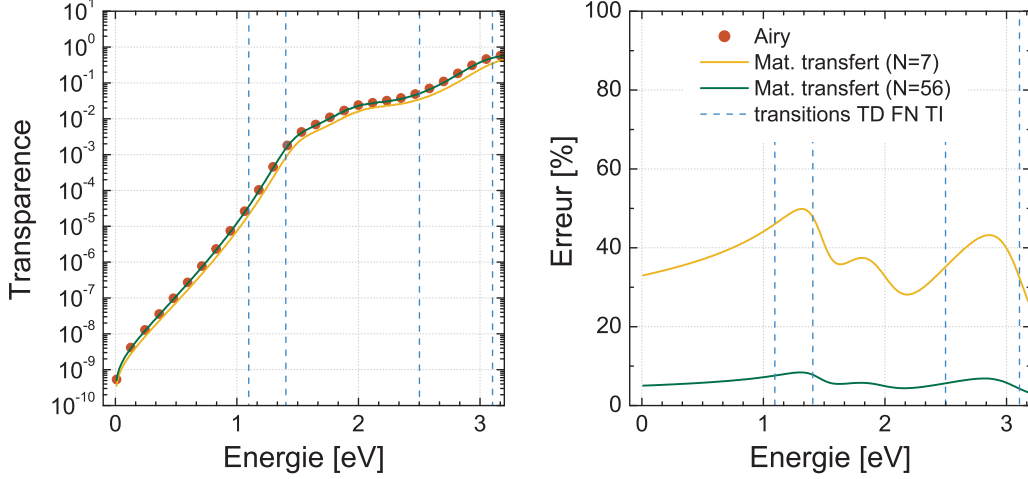


FIGURE 3.13 – Transparence d'un empilement  $8\text{\AA}$   $\text{SiO}_2$  -  $20\text{\AA}$   $\text{HfO}_2$  -  $\text{TiN}$  calculée suivant les approches d'Airy et des matrices de transfert (paramètres de simulation identiques à la Figure 3.10).

Cette approche présente l'avantage de s'appliquer à n'importe quel profil de barrière de potentiel. Néanmoins, elle peut présenter un coût numérique non négligeable quand  $N$  est important.

### 2.1.6 Méthode de la hauteur de barrière effective

Nous avons précédemment observé que la méthode des matrices de transfert considérant un faible nombre  $N$  de points de maillage sous-estime la transparence réelle de la barrière. Nous proposons une nouvelle méthode de calcul de la transparence, présentant l'avantage d'être analytique, de prendre en compte les réflexions des fonctions d'onde aux interfaces et d'être valable pour des gammes énergie correspondant aux transitions TD - FN - TI (pas d'approximation  $E \ll \phi_{\text{ox}}$  comme dans le cas de la méthode WKB avancée).

Cette approche originale consiste à approximer la double barrière trapézoïdale en une double barrière carrée [48]. Pour chacune d'entre elles, la notion de hauteur de barrière effective est introduite :

$$\phi_{\text{eff}} = \phi_{\text{ox}} - \frac{V_{\text{ox}}}{2}, \quad (3.14)$$

et correspond à l'énergie potentielle moyenne dans une barrière trapézoïdale (cf. Figure 3.14). Cette approximation est à rapprocher de la méthode des matrices de transfert avec  $N = 2$  (1 point de maillage par diélectrique), la seule différence résidant dans la prise en compte du champ électrique par l'intermédiaire de l'approximation de la barrière effective.

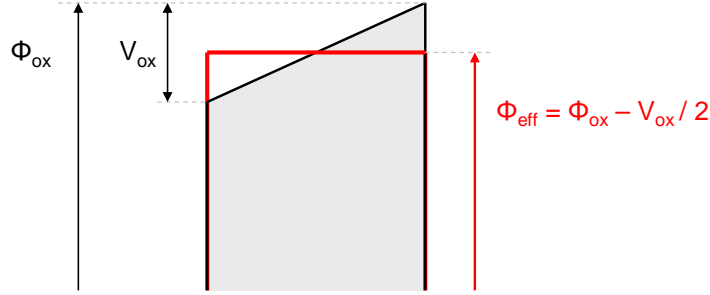


FIGURE 3.14 – Approximation d’une barrière trapézoïdale de hauteur  $\phi_{ox}$  sous potentiel  $V_{ox}$  en une barrière carrée de hauteur effective  $\phi_{eff}$ .

Les solutions de l’équation de Schrödinger dans les barrières carrées sont connues, et la résolution des équations de passage pour la double barrière donne l’expression analytique de la transparence :

$$T_{\phi_{eff}}(E) = \frac{v_{Si}}{v_m} \frac{4}{|\text{ch2} (A \text{ ch1} - B \text{ sh1}) - \text{sh2} (C \text{ ch1} - D \text{ sh1})|^2}, \quad (3.15)$$

avec :

$$\begin{aligned} A &= \frac{v_{Si}}{v_m} + 1 & \text{ch1} &= \cosh(K_1 t_1) \\ B &= \frac{i \cdot v_{Si}}{v_2^*} + \frac{v_2^*}{i \cdot v_m} & \text{ch2} &= \cosh(K_2 t_2) \\ C &= \frac{i \cdot v_{Si}}{v_1^*} + \frac{v_1^*}{i \cdot v_m} & \text{sh1} &= \sinh(K_1 t_1) \\ D &= \frac{v_2^*}{v_1^*} + \frac{v_{Si} \cdot v_1^*}{v_m \cdot v_2^*} & \text{sh2} &= \sinh(K_2 t_2) \end{aligned} \quad (3.16)$$

et où  $v_j$  sont les vitesses thermiques, fonctions des nombres d’onde  $k_j$  ( $v_j = \hbar k_j / m_j$ ) donnés par :

$$\begin{aligned} k_{Si} &= \frac{\sqrt{2m_{Si}E}}{\hbar}, \\ K_2^* &= \frac{\sqrt{2m_2(\phi_{eff,2} - E)}}{\hbar}, \\ K_1^* &= \frac{\sqrt{2m_1(\phi_{eff,1} - V_2 - E)}}{\hbar}, \\ k_m &= \frac{\sqrt{2m_0(E + V_1 + V_2 + \text{WF}_m)}}{\hbar}, \end{aligned} \quad (3.17)$$

avec  $\text{WF}_m$  la position du niveau de Fermi du métal de grille par rapport à la bande de conduction du Silicium.

## 2. Modélisation du courant tunnel

Cette méthode originale est comparée à la transparence calculée par le formalisme d’Airy dans la Figure 3.15. Approximer une double barrière trapézoïdale en une double barrière carrée donne une solution très proche de la solution exacte, exceptée une erreur proche de 80% autour des transitions TD - FN - TI dans le diélectrique high- $\kappa$ . Cette erreur peut sembler importante, mais il faut néanmoins la rapprocher des gammes de valeurs prises par la transparence, variant de plusieurs décades en fonction de l’énergie incidente des porteurs. Dans l’approximation que nous avons choisi, la transition est immédiate entre transport direct et thermoïonique, du fait des barrières carrées. Cette transition “binaire” ne prend ainsi pas en compte un transport de type Fowler-Nordheim, ce qui explique le pic d’erreur relative observé.

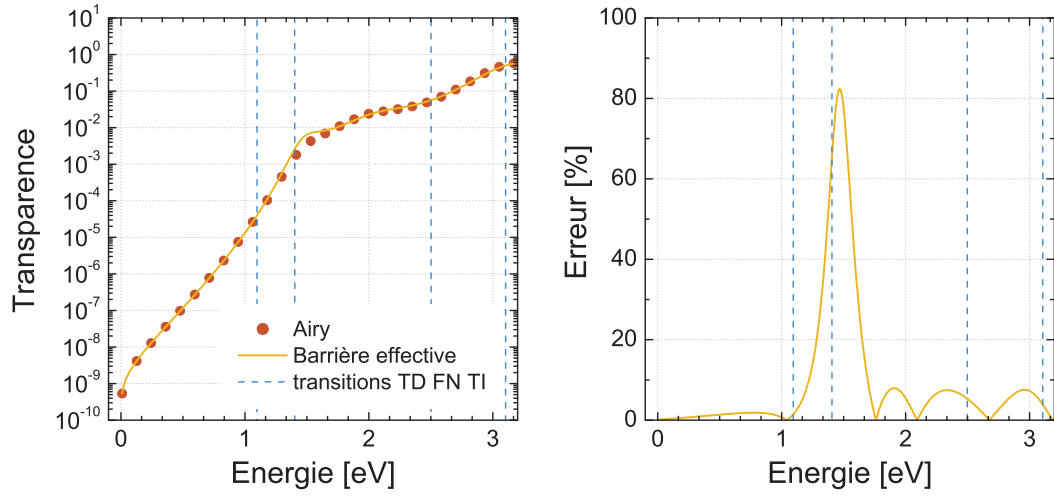


FIGURE 3.15 – Transparence d’un empilement 8Å SiO<sub>2</sub> - 20Å HfO<sub>2</sub> - TiN calculée suivant les approches d’Airy et de la barrière effective (paramètres de simulation identiques à la Figure 3.10).

### 2.1.7 Résumé

Le Tableau 3.2 résume les différentes méthodes de calcul de la transparence tunnel que nous avons évoqué. Différents critères permettent de différencier les approches en fonction des applications visées. Ainsi, dans le cas d’empilements ultra-minces, la prise en compte des réflexions aux interfaces s’avérera de première importance. Le courant de grille dans des empilements plus épais étant susceptible d’être assuré par un mécanisme de type Fowler-Nordheim, la pertinence de la modélisation des transitions TD - FN - TI sera également essentielle. Enfin, en pratique, des raisons de souplesse et/ou d’intégration au sein d’une approche numérique nécessiteront l’utilisation d’une approche analytique.

Pour chaque méthode de calcul de la transparence, ces critères sont évalués de la manière suivante :

### Chapitre 3. Etude de la conduction dans un empilement nMOS HfO<sub>2</sub>

- ✓ : le critère est parfaitement respecté,
- ≈ : la méthode de calcul de la transparence s’approche fortement du respect du critère,
- ✗ : l’approche en question ne remplit pas le critère.

Dans la suite de ce chapitre, la simulation de courant tunnel s’appuiera sur le formalisme des fonctions d’Airy pour le calcul de la transparence. Nous garderons en mémoire que des résultats similaires peuvent être obtenus par la méthode des matrices de transfert (approche numérique) ou la méthode de la barrière effective que nous proposons (approche analytique) en fonction de l’outil de simulation utilisé. Dans le cas d’empilements ultra-minces dans lesquels seul un mécanisme Tunnel Direct explique la conduction, la méthode analytique WKB avancée que nous avons proposé est également une solution pertinente pour la modélisation de la transparence.

	Réflexions aux interfaces	Transitions TD / FN / TI	Approche analytique	Solution “exacte”
WKB	✗	✓	✓	✗
WKB avancé	✓	✗	✓	✗
Airy	✓	✓	✗	✓
Matrices de transfert	✓	✓	✗	≈
Barrière effective	✓	≈	✓	≈

TABLEAU 3.2 – Comparaison des différentes méthodes de calcul de la transparence tunnel d’une double barrière de potentiel trapézoïdale.

## 2.2 Modélisation du courant tunnel 2D

En régime d’inversion nMOS, la composante  $J_{2D_{BCe}}$  du courant de grille est portée par les électrons confinés dans la bande de conduction du Silicium. On parle par abus de langage de *courant 2D*. Il en est de même pour les trous confinés dans la bande de valence, en régime d’accumulation nMOS (composante  $J_{2D_{BVh}}$ ). Nous prendrons dans ce paragraphe l’exemple du courant de grille en régime d’inversion, égal à la composante  $J_{2D_{BCe}}$  (cf. paragraphe 1).

Nous supposons que l’équilibre thermodynamique est vérifié dans le réservoir de départ. Le courant tunnel est considéré comme une infime perturbation, l’éventuel déficit de charge dû aux fuites de grille étant compensé par des sources infinies de trous et d’électrons (source-drain et substrat) : la charge dans le Silicium ne varie donc pas dans le temps. L’unique influence du courant tunnel sur la charge confinée est prise en compte en modélisant la pénétration des fonctions d’onde des électrons, comme détaillé dans le chapitre précédent.

La distribution de charge dans le substrat est obtenue par résolution Poisson-Schrödinger. Les grandeurs clés calculées par l’auto-cohérence et utilisées pour la

## 2. Modélisation du courant tunnel

---

modélisation du courant tunnel 2D sont :

- $\varepsilon_{n,\nu}$  : énergies quantifiées des porteurs d'une sous-bande  $n$  au sein d'une famille de sous-bandes  $\nu$  suivant la direction  $z$ ,
- $Q_{n,\nu}$  : charge portée par la sous-bande  $n$  d'une famille de sous-bandes  $\nu$ .

Dans une approche basée sur la notion de transparence, le courant tunnel 2D est la somme des contributions de chaque sous-bande  $n, \nu$  et s'exprime de la manière suivante :

$$\begin{aligned} I_g &= \sum_{n,\nu} \frac{Q_{n,\nu}}{\tau_{n,\nu}}, \\ &= \sum_{n,\nu} Q_{n,\nu} \cdot T(\varepsilon_{n,\nu}) \cdot f_{n,\nu}, \end{aligned} \quad (3.18)$$

où  $\tau_{n,\nu}$  est la durée de vie tunnel des porteurs situés sur un niveau  $n, \nu$ . Elle s'exprime en fonction de la transparence tunnel pour le niveau considéré  $T(\varepsilon_{n,\nu})$  et de la fréquence d'impact  $f_{n,\nu}$  (s'exprimant en  $s^{-1}$ ).

La fréquence d'impact est caractéristique du flux incident de porteurs sur la barrière de potentiel. Dans l'approximation quasi-classique (formalisme WKB), elle est donnée pour chaque sous-bande  $n, \nu$  par [28, 29] :

$$f = \left( \int_0^w \frac{2m}{\hbar k_z(z)} dz \right)^{-1}, \quad (3.19)$$

avec :

- $m = m_{Si} = m_\nu$  : la masse du porteur considéré dans le Silicium ( $m_L$  ou  $m_T$  dans l'exemple d'un courant tunnel d'électrons des vallées L et T),
- $w$  la largeur du puits quantique pour une énergie  $\varepsilon_{n,\nu}$  : on a  $E_c(w) = \varepsilon_{n,\nu}$  où  $E_c(z)$  désigne le profil de bande de conduction (cf. Figure 3.16),
- $k_z(z)$  : relation de dispersion suivant  $z$  pour un niveau  $n, \nu$  donné.

L'ensemble de ces grandeurs et la référence d'énergie sont schématisés en Figure 3.16.

Dans le cas précis de la modélisation de la fréquence d'impact, Dalla Serra et al. ont montré la validité de cette approche quasi-classique par comparaison avec une solution quantique [49]. La pertinence de l'approximation parabolique  $k_z(z) = \sqrt{2m(\varepsilon - E_c(z))/\hbar^2}$  est également validée ( $\varepsilon - E_c(z)$  étant l'écart suivant  $z$  entre un niveau quantifié et la bande de conduction).

L'approximation du puits triangulaire consiste à considérer un champ électrique constant dans le substrat. L'énergie potentielle s'exprime par  $E_{\text{pot}}(z) = (-Q_{\text{sc}}/\varepsilon_{\text{Si}}) \cdot z$  et conduit à l'expression analytique de la fréquence d'impact suivante [28] :

$$f_{n,\nu} = \frac{e \cdot Q_{\text{sc}}}{2\varepsilon_{\text{Si}} \cdot \sqrt{2m_\nu \varepsilon_{n,\nu}}}, \quad (3.20)$$

avec  $e$  la charge élémentaire et  $Q_{\text{sc}}$  la charge totale dans le substrat Silicium. On notera que l'approximation du puits triangulaire permet également le calcul appro-

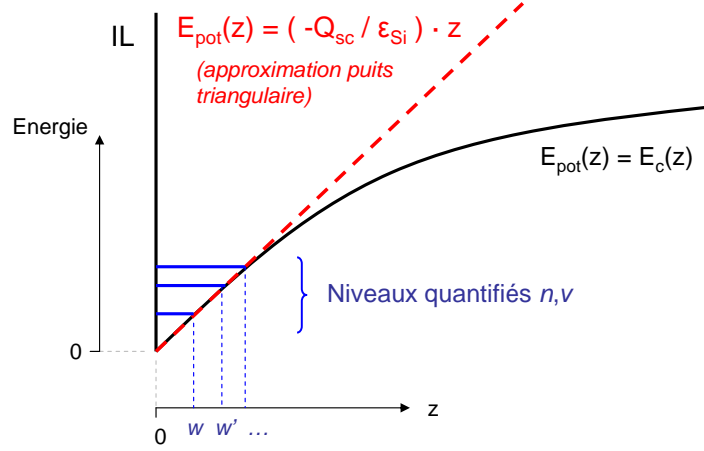


FIGURE 3.16 – Représentation schématique d'un puits d'inversion d'électrons et des grandeurs utiles à la modélisation de la fréquence d'impact WKB.

ché de la charge dans le Silicium. Un tel modèle a été développé dans le cadre de cette thèse et présenté dans [50].

Pour conclure, la modélisation des composantes tunnel 2D du courant de grille s'appuie sur les résultats de simulation Poisson-Schrödinger. Pour un dopage substrat donné, une seule simulation est nécessaire pour modéliser le courant dans des empilements d'épaisseurs différentes : nous avons en effet souligné la relative indépendance de la distribution de charge à l'interface IL - Silicium dans le substrat avec les paramètres de l'empilement diélectrique (cf. chapitre 2). Cette approche quantique permet donc une description précise de la charge incidente et de la fréquence d'impact.

La transparence de la double barrière de potentiel est fonction des paramètres tunnel de l'empilement, intrinsèques aux matériaux IL et high- $\kappa$ . Ils seront extraits en comparant mesures expérimentales et simulations théoriques.

### 2.3 Modélisation du courant tunnel 3D

Dans un empilement nMOS, les composantes  $J_{3D_{\text{BVe}}}$  et  $J_{3D_{\text{METe}}}$  sont les 2 transitions mettant en jeu des gaz de porteurs libres (3D). Nous détaillons dans ce paragraphe la modélisation du courant  $J_{3D_{\text{METe}}}$ , courant d'électrons de la grille métallique vers le substrat en condition d'accumulation nMOS. Le modèle présenté s'appliquera de même au calcul de la composante  $J_{3D_{\text{BVe}}}$ .

La Figure 3.17 détaille les grandeurs et la référence d'énergie utiles à la modélisation du courant 3D.  $E_{\text{FM}}$  désigne le niveau de Fermi du métal injecteur. Dans un gaz 3D, l'énergie des porteurs  $E$  se décompose en une composante  $E_z$  suivant  $z$  et

## 2. Modélisation du courant tunnel

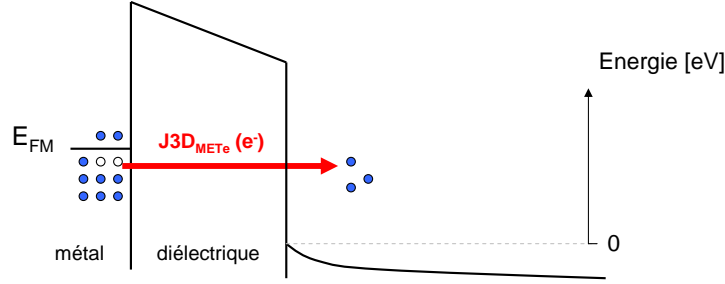


FIGURE 3.17 – Représentation schématique du courant  $J3D_{BVe}$  en régime d'accumulation nMOS.

une composante dans le plan parallèle  $E_{//}$ . Le courant 3D est donné par [51] :

$$\begin{aligned} J3D_{BVe} &= \frac{4\pi e m_0}{h^3} \int_0^\infty T(E_z) f_e(E_z + E_{//}) dE_z dE_{//} \\ &= \frac{4\pi e m_0}{h^3} k_B T \int_0^\infty T(E_z) \ln \left[ 1 + \exp \left( \frac{E_{FM} - E_z}{k_B T} \right) \right] dE_z, \end{aligned} \quad (3.21)$$

avec  $f_e$  la statistique de Fermi-Dirac,  $h$  la constante de Planck,  $T$  la température,  $k_B$  la constante de Boltzmann,  $m_0$  la masse de l'électron libre et les grandeurs énergétiques exprimées en joules<sup>5</sup>. Comme déjà abordé, la transparence ne dépend que de l'énergie incidente  $E_z$ , ce qui permet de simplifier l'expression du courant tunnel 3D. A noter également que la borne inférieure d'intégration est 0 pour  $E_z$  : le transport tunnel est en effet interdit dans le gap du Silicium ( $E_z < 0$ ).

Appliquée à la modélisation de la composante  $J3D_{BVe}$ , l'Equation 3.21 doit être modifiée comme suit :

- modification de la masse des porteurs incidents ( $m_0$  dans le cas précédent, masses effectives des électrons dans le cas de  $J3D_{BVe}$ ),
- modification des bornes d'intégration de l'intégrale, du niveau de Fermi du métal à la bande de valence du Silicium (voir Figure 3.2, page 62).

### 2.4 Influence de la pénétration des fonctions d'onde

La prise en compte de la pénétration des fonctions d'onde dans les diélectriques modifie la distribution de charge dans le Silicium et la caractéristique  $C(V_g)$ , comme nous l'avons souligné dans le chapitre 2. La description pertinente de la charge incidente étant un élément-clé de la modélisation tunnel, nous attendons une variation du courant tunnel en intégrant ou non la pénétration des fonctions d'onde dans la simulation Poisson-Schrödinger. Les grandeurs principalement impactées sont :

- la position des niveaux d'énergie confinés, plus faible en intégrant la pénétration des fonctions d'onde,

5. Exprimer les énergies en eV est possible à condition d'élever au cube la charge élémentaire  $e$  dans le premier facteur.



- la charge, plus importante quand on considère la pénétration, les niveaux confinés étant plus proches du niveau de Fermi.

La Figure 3.18 illustre l'influence de cette prise en compte sur la modélisation du courant tunnel en régime d'inversion. On ne note pas d'impact significatif sur la simulation du courant de grille. Seul un écart sur la tension de seuil  $V_T$  est visible, de l'ordre de 10mV : il s'explique par les valeurs des niveaux quantifiés  $\varepsilon_{n,\nu}$ , différentes entre les 2 approches.

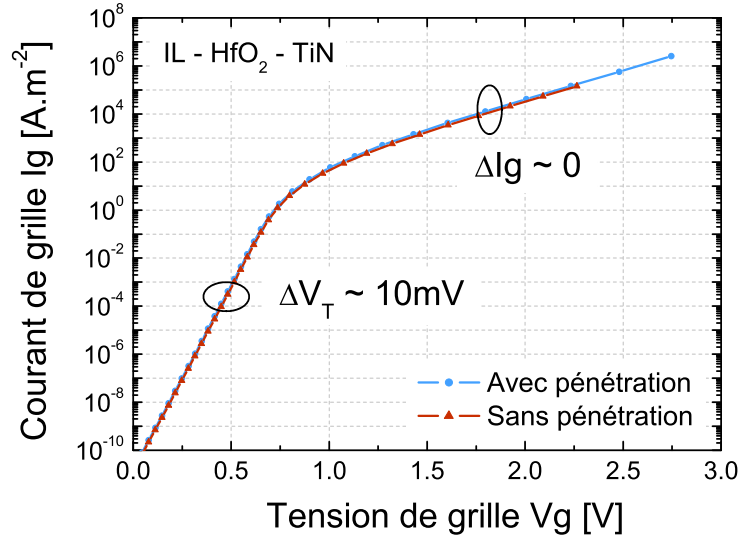


FIGURE 3.18 – Courant tunnel dans un empilement 8Å SiO<sub>2</sub> - 20Å HfO<sub>2</sub> - TiN calculé en considérant ou non la pénétration des fonctions d'onde dans les diélectriques de grille ( $V_{FB} = -0,4V$ ,  $\phi_2 = 3,1eV$ ,  $\phi_1 = 2eV$ ,  $m_2 = 0,5m_0$  et  $m_1 = 0,2m_0$ ).

Pour une épaisseur physique ou une valeur d'EOT donnée, ne pas considérer la pénétration des fonctions d'onde n'a donc pas d'impact significatif sur la simulation tunnel.

Toutefois, dans une approche expérimentale consistant à ajuster les caractéristiques  $C(V_g)$  expérimentales et théoriques, cette même approximation conduit à sous-estimer l'EOT d'environ 1Å (cf. chapitre 2). On retrouve ainsi un résultat en accord avec les travaux de C. Leroux et al. [52] et O. Simonetti et al. [53] qui comparent différentes approches pour extraire l'EOT d'un empilement SiO<sub>2</sub>. Les auteurs comparent notamment l'EOT extrait par ajustement de la caractéristique  $C(V_g)$  ou de la caractéristique  $I_g(V_g)$ <sup>6</sup>, le tout sans prendre en compte la pénétration des fonctions d'onde.

Nous avons vu que ne pas considérer la pénétration des fonctions d'onde n'influe pas la valeur d'EOT extraite par ajustement  $I_g(V_g)$  et les valeurs données dans [52,

6. Dans cette démarche expérimentale, tous les paramètres (tunnel notamment) sont considérés connus et seul l'EOT est un paramètre d'ajustement.

## 2. Modélisation du courant tunnel

---

53] avec cette méthode peuvent donc être légitimement considérées comme proches de la réalité. Néanmoins, ces études soulignent que les valeurs d'EOT des mêmes empilements extraites par ajustement  $C(V_g)$  sont plus faibles. Cette observation est cohérente avec les résultats du chapitre 2, à savoir une sous-estimation de l'EOT quand on ne prend pas en compte la pénétration des fonctions d'onde.

La prise en compte de la pénétration des fonctions d'onde apparaît donc indispensable dans toute démarche expérimentale d'extraction d'EOT.

### 3 Identification des mécanismes de conduction

La température de mesure et l'épaisseur des diélectriques de grille sont les principaux facteurs discriminants permettant d'identifier expérimentalement les différents mécanismes de conduction. Faire varier ces paramètres permet d'étudier les mécanismes de transport privilégiés dans l'IL et dans le high- $\kappa$  étudié, et ce en fonction de leurs épaisseurs respectives.

#### 3.1 Description des échantillons et méthodologie expérimentale

Différents transistors nMOS de surface  $10 \times 10 \mu\text{m}^2$  et  $100 \times 100 \mu\text{m}^2$  sur substrat Silicium bulk orienté  $\langle 100 \rangle$  ont été réalisés puis testés pour l'étude du courant de grille.

Des structures de références SiO<sub>2</sub> - Polysilicium ont tout d'abord été utilisées pour valider la méthodologie de caractérisation et la modélisation tunnel. Ces structures (appelées *i* et *ii*) présentent différentes épaisseurs  $t_{\text{SiO}_2}$  réalisées par croissance thermique (RTO : *Rapid Thermal Oxidation*). Ce procédé de croissance permet un excellent contrôle de l'épaisseur d'oxyde finale, comme démontré par P. Mur et al. [54] ou dans l'article de référence de Green et al. [55].

Nous avons évoqué en introduction de ce manuscrit la nécessaire présence d'une couche interfaciale SiO<sub>2</sub> entre le Silicium et le HfO<sub>2</sub>. Pour étudier les propriétés de ces 2 matériaux, nous avons choisi de réaliser des empilements avec grille métallique TiN présentant différentes épaisseurs d'oxyde interfacial SiO<sub>2</sub> ( $t_{\text{IL}}$ ) et de HfO<sub>2</sub> ( $t_{\text{HfO}_2}$ ). Pour les variantes de  $t_{\text{IL}}$  avec  $t_{\text{HfO}_2} = \text{cte}$  (empilements notés *v*, *vi* et *vii*), une croissance thermique RTO est utilisée pour la réalisation de l'IL, procédé permettant d'avoir une bonne maîtrise de l'épaisseur finale. Pour les variantes de  $t_{\text{HfO}_2}$  à  $t_{\text{IL}} = \text{cte}$  (empilements notés *viii*, *ix* et *x*), l'oxyde interfacial est réalisé lors du nettoyage chimique du substrat Silicium. Ce procédé ne permet certes pas un bon contrôle de l'épaisseur, mais des études internes au CEA-LETI permettent toutefois de prédire une épaisseur nominale  $t_{\text{IL}} \approx 0,8\text{nm}$ .

Toutes les couches HfO<sub>2</sub> ont été déposées suivant le même procédé : une croissance de type ALD (*Atomic Layer Deposition* : deposition par mono-couches atomiques) a été choisie, garantissant un excellent contrôle de l'épaisseur finale. Le précurseur de la croissance ALD est HfCl<sub>4</sub> et un recuit basse température (600°C) accompagne ce procédé. Enfin, la grille TiN a été déposée par voie chimique en phase vapeur (CVD : *Chemical Vapor Deposition*), pour une épaisseur visée de 10nm.

Dans une approche standard dite *gate first*, la grille est réalisée puis sert de masque protecteur du canal de Silicium lors de l'implantation des dopants de la source et du drain. Le recuit haute température (plus de 1000°C) utilisé classiquement pour activer les dopants après l'implantation ionique est susceptible de dégrader les propriétés du matériau de grille, induisant un décalage de la tension de seuil  $V_T$ . Ce point est particulièrement critique pour l'optimisation des transistors pMOS HP (Haute-Performance).

Pour cette raison, INTEL et TSMC se tournent aujourd'hui vers une approche

### 3. Identification des mécanismes de conduction

dite *gate last* : le recuit haute température d'activation des dopants est réalisé avant le dépôt de la grille, selon le procédé décrit dans [56, 57]. C'est cette même approche qui a été retenue pour la réalisation des transistors étudiés (procédé damascène). Notons tout de même que selon T. P. Ma (Yale University), la réduction (voire la suppression) de l'oxyde interfacial, voie prometteuse pour réduire l'EOT, nécessite des réactions chimiques à haute température plus compatibles avec une approche *gate first* que *gate last*<sup>7</sup>. Le débat est donc encore ouvert sur les options technologiques les plus à même de respecter les spécifications de l'ITRS pour les nœuds 22nm et en deçà.

La liste des caractéristiques des échantillons testés figure dans le Tableau 3.3. Les épaisseurs données sont les épaisseurs visées (nominales) : les épaisseurs réelles peuvent différer de cette valeur, comme nous le verrons dans le paragraphe 4.1.

Dispositif	$t_{\text{IL}} / t_{\text{SiO}_2}$ (nm)	$t_{\text{HfO}_2}$ (nm)	Na ( $\text{m}^{-3}$ )	Grille	Process IL / SiO <sub>2</sub>	EOT (nm)
<i>i</i>	1,5	×	$1.10^{24}$	Poly $\text{n}^+$	RTO	1,78
<i>ii</i>	2,5	×	$1.10^{24}$	Poly $\text{n}^+$	RTO	2,62
<i>iii</i>	1,5	×	$2.10^{23}$	TiN	RTO	1,56
<i>iv</i>	2,5	×	$2.10^{23}$	TiN	RTO	2,61
<i>v</i>	1,2	3,0	$2.10^{23}$	TiN	RTO	2,07
<i>vi</i>	1,5	3,0	$2.10^{23}$	TiN	RTO	2,30
<i>vii</i>	2,0	3,0	$2.10^{23}$	TiN	RTO	2,74
<i>viii</i>	0,8	2,0	$2.10^{23}$	TiN	Chimique	1,16
<i>ix</i>	0,8	3,0	$2.10^{23}$	TiN	Chimique	1,41
<i>x</i>	0,8	4,5	$2.10^{23}$	TiN	Chimique	1,73

TABLEAU 3.3 – Caractéristiques des dispositifs nMOS caractérisés.

La charge dans le semiconducteur évolue avec la température : considérer uniquement des caractéristiques en fonction de  $V_g$  ne permet pas de conclure sur l'origine de l'activation thermique (charge ou transport). A partir des caractéristiques  $I_g(V_g)$  et  $Q_{\text{sc}}(V_g)$ , le tracé de la relation expérimentale  $I_g(Q_{\text{sc}})$  permet alors d'étudier le transport dans l'empilement à charge constante, et donc de discriminer l'évolution de la charge avec l'activation thermique du transport dans l'empilement. Pour un empilement et une température de mesure donnée, la méthodologie expérimentale établie se décompose donc comme suit :

#### 1. Mesure $I_g(V_g)$ et séparation de porteurs

Les mesures de courant de grille ont été couplées aux mesures conjointes des courants  $I_{\text{sd}}$  (courant source-drain) et  $I_b$  (courant de substrat). L'étude de la séparation des porteurs permet en effet d'identifier les composantes à l'origine

7. Propos rapportés dans l'édition de mars 2010 de Semiconductor International.

de la conduction (courants d'électrons, de trous, 2D, 3D...), identification nécessaire à toute modélisation du courant tunnel total. Les densités de courant obtenues ont également été comparées pour différentes surfaces de grille pour s'assurer de l'absence d'éventuelles résistances séries.

### 2. Mesure $C(V_g)$

Pour chaque empilement, différentes caractéristiques  $C(V_g)$  ont été obtenues pour différentes fréquences de mesure. Les distorsions des caractéristiques électriques liées aux fuites de grille ou aux résistances séries sont en effet plus ou moins prononcées suivant la fréquence choisie [58]. Nous avons dans tous les cas retenu les caractéristiques obtenues à  $f = 100\text{kHz}$ , considérées représentatives du comportement intrinsèque de la structure MOS. Ces caractéristiques ont de plus été corrigées des capacités parasites dues au système de mesure et au proche environnement du dispositif [59].

### 3. Extraction de paramètres

La caractéristique  $C(V_g)$  permet ensuite l'extraction de l'EOT, de la tension de bandes plates  $V_{FB}$  et du dopage substrat Na en l'ajustant à la caractéristique théorique obtenue par résolution Poisson-Schrödinger (cf. chapitre 2).

### 4. Tracé des caractéristiques $I_g(Q_{sc})$

Connaissant la valeur de  $V_{FB}$ , la relation  $Q_{sc}(V_g)$  expérimentale est donnée par :

$$Q_{sc}(V_g) = - \int_{V_{FB}}^{V_g} C(u) du \quad (3.22)$$

Néanmoins, même dans le cas d'un transport tunnel, un léger écart sur les tracés  $I_g(Q_{sc})$  pour différentes température est susceptible d'être observé (cf. Figure 3.19) comme le montrent ces résultats de simulation obtenus en prenant uniquement en compte le courant tunnel. La comparaison est certes faite à charge totale constante, mais la distribution énergétique de cette charge est différente en fonction de la température. Ainsi, à 80K, la position des niveaux confinés sera plus basse qu'à 400K, et la transparence de la barrière pour l'ensemble des porteurs sera donc légèrement plus faible. De plus, la dépendance de la distribution énergétique avec la température joue aussi un rôle sur la fréquence d'impact des porteurs, modifiant d'autant le courant tunnel (cf. Equation 3.20).

## 3.2 Observations expérimentales

Nous présentons dans un premier temps les résultats expérimentaux obtenus sur des empilements SiO<sub>2</sub> à grille Polysilicium ou TiN, pour lesquels un mécanisme de conduction tunnel est attendu, et donc peu activé en température [24, 25]. Dans une deuxième partie sont présentées les caractéristiques  $I_g(Q_{sc})$  obtenues sur différents empilements IL - HfO<sub>2</sub> - TiN.

### 3. Identification des mécanismes de conduction

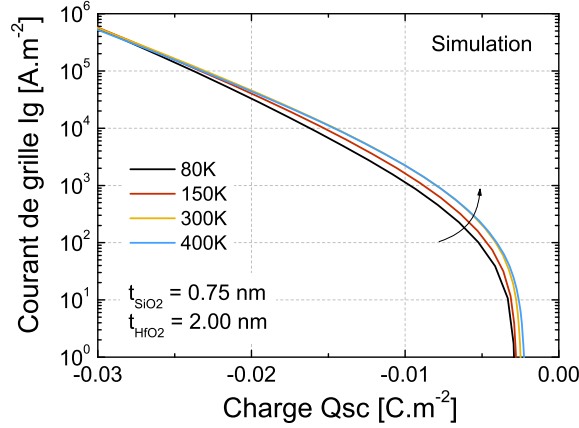


FIGURE 3.19 – Caractéristiques  $I_g(Q_{sc})$  simulées pour différentes températures dans un empilement  $\text{SiO}_2 - \text{HfO}_2$ . Les paramètres tunnel utilisés sont  $\phi_{\text{SiO}_2} = 3,1\text{eV}$ ,  $\phi_{\text{HfO}_2} = 2\text{eV}$ ,  $m_{\text{SiO}_2} = 0,5m_0$  et  $m_{\text{HfO}_2} = 0,2m_0$

#### 3.2.1 Empilements $\text{SiO}_2$

La Figure 3.20 représente l'évolution du courant de grille en fonction de la température dans les empilements  $\text{SiO}_2$  avec grille Polysilicium (dispositifs *i* et *ii*) ou métallique TiN (dispositifs *iii* et *iv*). Comme attendu, seule une activation thermique négligeable est observée pour les différentes épaisseurs  $t_{\text{SiO}_2}$ , tant en régime d'inversion ( $Q_{sc} < 0$ ) que d'accumulation ( $Q_{sc} > 0$ ). On observe une différence entre les empilements à grille Polysilicium et TiN à faible champ ( $-0,005 < Q_{sc} < 0$ ) : dans cette zone, le courant de grille est inférieur pour les empilements Polysilicium car le gap de la grille est situé sur une gamme énergétique semblable à celle des porteurs dans le substrat, ce qui interdit toute transition vers la grille à travers le  $\text{SiO}_2$ .

Nous remarquons de plus que les empilements à grille Polysilicium ou TiN présentent des niveaux de courant équivalents à charge constante. Néanmoins, il faut souligner qu'à tension de grille constante, le courant de grille sera plus faible dans un empilement Polysilicium : la chute de potentiel dans la grille induit un champ électrique dans l'oxyde plus faible que dans le cas d'un empilement TiN.

Néanmoins, l'absence d'activation thermique ne signifie pas forcément que le mécanisme de conduction prépondérant est de type tunnel. Les pièges peuvent être "profonds" (c'est-à-dire de faible énergie par rapport à la bande de conduction du diélectrique), favorisant une transition TAT élastique sans pour autant permettre les transitions TAT inélastique ou Poole-Frenkel à haute température. Seule la comparaison entre caractéristique expérimentale  $I_g(V_g)$  à basse température et modélisation tunnel permettra de conclure définitivement quant au mécanisme de conduction dans un empilement  $\text{SiO}_2$  (cf. paragraphe 4).

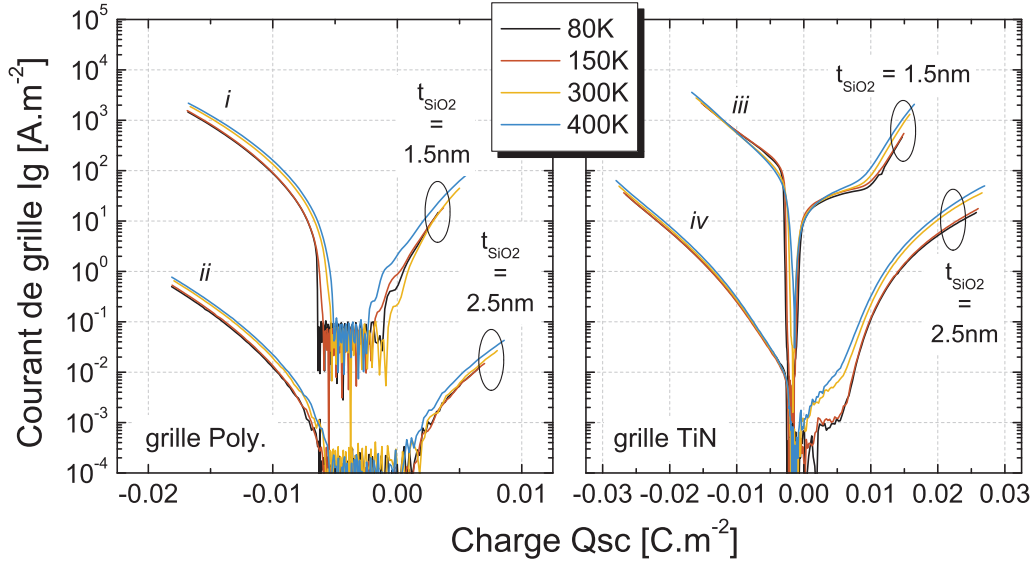


FIGURE 3.20 – Caractéristiques  $I_g(Q_{sc})$  mesurées pour différentes températures sur des empilements SiO<sub>2</sub> - Polysilicium et SiO<sub>2</sub> - TiN. Les caractéristiques de l'empilement *i* ont été obtenues sur un transistor de surface  $10 \times 10 \mu\text{m}^2$  et celles des empilements *ii*, *iii* et *iv* sur des transistors de surface  $100 \times 100 \mu\text{m}^2$ , ce qui explique les différents niveaux de bruit.

### 3.2.2 Empilements IL - HfO<sub>2</sub>

L'étude précédente a permis de valider la méthodologie mise en place. Elle va dans le sens des nombreuses études publiées dans la littérature qui expliquent le courant de fuite dans une couche SiO<sub>2</sub> ultra-mince par un mécanisme tunnel. Dans cette partie, nous appliquons cette méthodologie à l'étude d'empilements high- $\kappa$  afin de mesurer l'influence de l'introduction du diélectrique HfO<sub>2</sub> sur le niveau et l'activation thermique du courant de grille. Par rapport à un empilement SiO<sub>2</sub>, l'apparition de nouveaux mécanismes de conduction assistés par pièges réduirait d'autant le bénéfice de l'utilisation d'une épaisseur physique plus importante à EOT constant.

La Figure 3.21 représente l'évolution du courant de grille en fonction de la température dans les empilements présentant un oxyde interfacial d'épaisseur constante  $t_{IL} \approx 0,8\text{nm}$  et différentes épaisseurs de HfO<sub>2</sub>  $t_{\text{HfO}_2}$  (structures *viii*, *ix* et *x*). L'activation du courant de grille avec la température est différente selon le régime de fonctionnement :

#### 1. Régime d'inversion ( $Q_{sc} < 0$ )

Dans ce régime de fonctionnement, le courant de grille est porté par les électrons confinés dans la bande de conduction du Silicium (composante  $J_{2D_{\text{BCe}}}$ , cf. paragraphe 1).

### 3. Identification des mécanismes de conduction

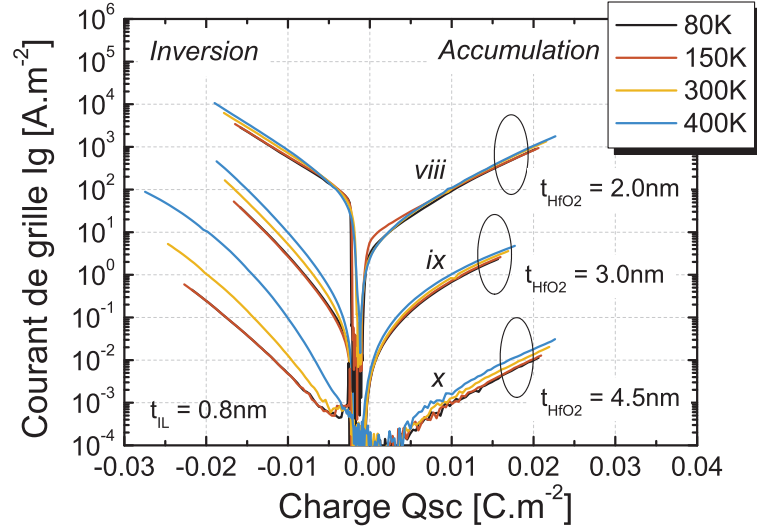


FIGURE 3.21 – Caractéristiques  $I_g(Q_{sc})$  mesurées pour différentes températures sur les empilements IL - HfO<sub>2</sub> - TiN avec  $t_{IL} = \text{cte} = 0,8\text{nm}$ .

Une forte activation du courant avec la température est observée sur les empilements les plus épais. Au sein de l'empilement  $x$  ( $t_{\text{HfO}_2} = 4,5\text{nm}$ ), le courant gagne ainsi presque 2 ordres de grandeur à fort champ. On en conclut un mécanisme soit de type TAT inélastique, soit Poole-Frenkel dès 300K, assisté par des pièges en volume dans le HfO<sub>2</sub>. La prédominance d'un de ces mécanismes assistés par pièges est en effet fonction de l'épaisseur de high- $\kappa$ , comme le montre l'absence d'activation pour  $t_{\text{HfO}_2} = 2\text{nm}$ . L'étude préliminaire menée par X. Garros et al. pour expliquer le phénomène d'hystérésis sur les mesures  $C(V_g)$  [60] confirme cette observation : elle montre la présence de pièges uniformément répartis en volume dans le diélectrique et situés à une distance  $\phi_t \approx 1\text{eV}$  de la bande de conduction du HfO<sub>2</sub>. Sous polarisation  $V_g > 0$ , ces pièges sont en regard de la charge dans le Silicium et assistent thermiquement le courant de grille.

A basse température ( $T = 80\text{K}$ ), le courant est soit de type tunnel, soit de type TAT élastique. Comme dans le cas des empilements SiO<sub>2</sub>, seule une comparaison entre théorie et expérience permettra de statuer sur la prédominance de tel ou tel mécanisme. Néanmoins, on peut légitimement conclure que le mécanisme de conduction est de type tunnel sur HfO<sub>2</sub> mince (empilement *viii*) : l'absence d'activation thermique montre le faible rôle joué par les pièges, quelle que soit la température. La Figure 3.22 illustre les différents mécanismes à l'origine du courant de grille à  $T = 300\text{K}$  en régime d'inversion.



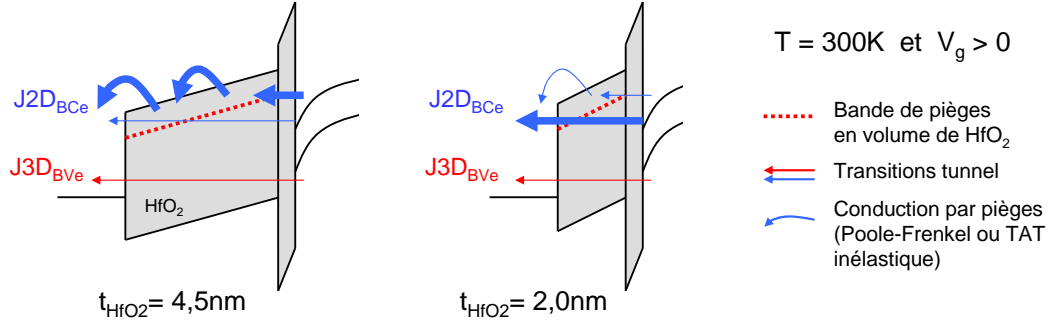


FIGURE 3.22 – Schéma des mécanismes de conduction à température ambiante dans des empilements minces ( $t_{\text{HfO}_2} = 2\text{nm}$ ) et épais ( $t_{\text{HfO}_2} = 4,5\text{nm}$ ). La largeur des flèches indique l'importance de la transition dans le courant de grille total.

## 2. Régime d'accumulation ( $Q_{\text{sc}} > 0$ )

En régime d'accumulation, aucune activation n'est observée : le courant de grille est égal au courant de substrat  $I_b$  (cf. paragraphe 1), et seule la comparaison entre modélisation et expérience permettra de déterminer clairement si il est dû au courant 2D de trous depuis la couche d'accumulation ( $J2D_{\text{BVh}}$ ) ou au courant 3D d'électrons depuis la grille ( $J3D_{\text{METe}}$ ). Les observations faites en régime d'inversion ont révélé la présence de pièges proches de la bande de conduction du HfO<sub>2</sub> : on peut supposer que la composante  $J3D_{\text{METe}}$  est activée en température, les électrons transitant de la grille vers le substrat traversant une zone riche en pièges. On peut ainsi légitimement supposer que le courant de grille en accumulation est un courant de trous confinés dans la couche d'accumulation, et que les diélectriques de grille sont pauvres en pièges dans les zones en regard de la bande de valence du Silicium.

L'absence de pièges en regard de la bande de valence du Silicium est confirmée par l'analyse de séparation de porteurs dans l'empilement  $x$  ( $t_{\text{HfO}_2} = 4,5\text{nm}$ ), représentée Figure 3.23. En régime d'inversion, le courant de substrat  $I_b$  est égal au courant  $J3D_{\text{BVe}}$ . Cette composante n'est pas thermiquement assistée, ce qui va dans le sens de notre hypothèse.

En revanche, les limitations imposées par le système de mesure ne permettent pas de détecter l'activation thermique attendue pour le courant  $I_{\text{sd}}$  (égal dans notre hypothèse à  $J3D_{\text{METe}}$ ) en régime d'accumulation.

Dans le paragraphe 5, nous comparerons le courant de grille expérimental en accumulation à la théorie tunnel pour valider ou contredire cette hypothèse.

L'étude des empilements présentant une épaisseur  $t_{\text{HfO}_2} = \text{cte}$  et différentes épaisseurs d'IL (structures  $v$ ,  $vi$  et  $vii$ ) confirme les conclusions tirées de l'analyse précédente. La Figure 3.24 montre une activation thermique du courant en régime d'inversion constante quelle que soit l'épaisseur de l'IL. Cette observation est en accord avec une activation thermique uniquement dépendante de l'épaisseur de HfO<sub>2</sub>, et, de plus, montre que l'oxyde interfacial RTO ne possède pas de pièges dans son

### 3. Identification des mécanismes de conduction

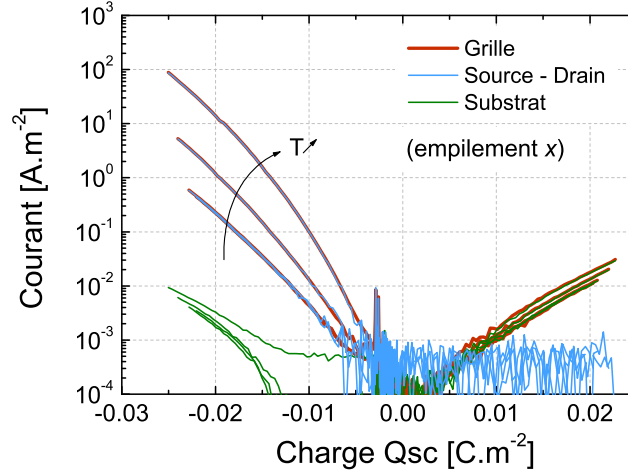


FIGURE 3.23 – Mesures de séparation de porteurs en fonction de la température dans l'empilement  $x$  ( $t_{\text{HfO}_2} = 4,5\text{nm}$ ). A noter que l'augmentation du courant  $I_b$  à faible champ n'est qu'un artefact dû à la présence d'un courant parasite dans le système de mesure.

gap susceptibles d'assister thermiquement le courant de grille en régime d'inversion (conformément aux observations faites sur les empilements  $\text{SiO}_2$  *i*, *ii*, *iii* et *iv*). En régime d'accumulation, nous retrouvons une absence d'activation du courant avec la température.

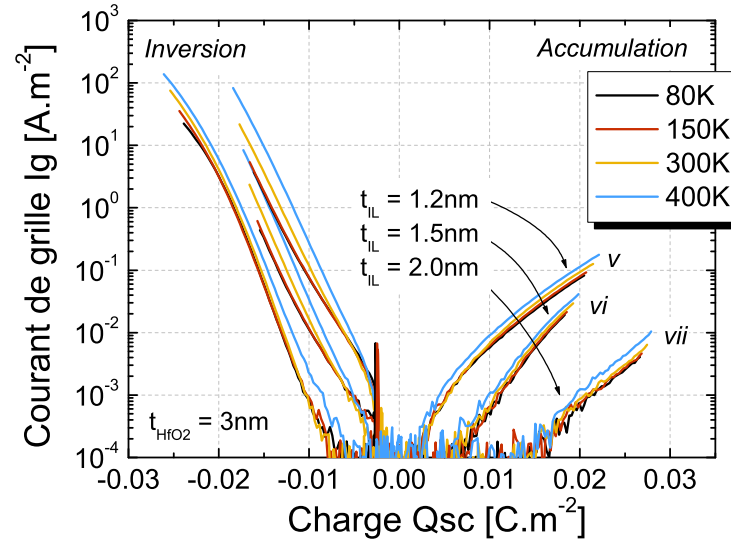


FIGURE 3.24 – Caractéristiques  $I_g(Q_{sc})$  mesurées pour différentes températures sur les empilements IL -  $\text{HfO}_2$  - TiN avec  $t_{\text{HfO}_2} = \text{cte} = 3,0\text{nm}$ .

### 3.3 Conclusions

Comme attendu, l'analyse des empilements SiO<sub>2</sub> à grille Polysilicium ou métallique TiN ne montre pas de dépendance du courant de grille avec la température, et ce pour des empilements minces (dispositifs *i* et *iii*,  $t_{\text{SiO}_2} = 1,5\text{nm}$ ) ou plus épais (dispositifs *ii* et *iv*,  $t_{\text{SiO}_2} = 2,5\text{nm}$ ). Ces observations confirment les résultats de la littérature, qui attribue le courant de grille dans des couches minces SiO<sub>2</sub> par un mécanisme tunnel. A ce stade, seule une comparaison avec un modèle théorique approprié permettra d'asseoir définitivement cette hypothèse : un courant TAT élastique assisté par des pièges profonds (ne permettant donc pas l'activation thermique Poole-Frenkel ou TAT inélastique) peut également être à l'origine de la conduction.

L'analyse des empilements high- $\kappa$  révèle une activation thermique du courant en régime d'inversion, uniquement dépendante de l'épaisseur de HfO<sub>2</sub> (indépendance avec  $t_{\text{IL}}$ ). Cette activation est probablement due à la présence d'une bande de pièges en volume de HfO<sub>2</sub> situés à environ 1 eV de la bande de conduction et mise en évidence par des techniques de caractérisation alternatives [60]. Pour  $T > 300\text{K}$ , les pièges induisent dans le courant de grille une composante Poole-Frenkel ou TAT inélastique, prépondérante par rapport au courant tunnel dans les empilements *ix* et *x* ( $t_{\text{HfO}_2} = 3,0\text{nm}$  et  $t_{\text{HfO}_2} = 4,5\text{nm}$ ). A basse température, le courant peut être de type tunnel ou TAT élastique. Pour  $t_{\text{HfO}_2} = 2,0\text{nm}$  (empilement *viii*), le mécanisme à l'origine de la conduction semble de type tunnel, quelle que soit la température.

En régime d'accumulation, le courant de grille semble égal au courant de trous confinés dans la couche d'accumulation ( $J_{2D_{\text{BVh}}}$ ) et ne montre pas d'activation avec la température. De la même façon, seule une comparaison entre expérience et théorie tunnel permettra de conclure avec certitude sur le mécanisme à l'origine de la conduction.

## 4 Extraction de paramètres en régime d'inversion

Dans cette partie, nous nous concentrons sur le régime d'inversion nMOS. Dans un empilement IL - high- $\kappa$  - TiN, le courant de grille est un courant d'électrons confinés dans la bande de conduction du Silicium, nécessitant le modèle tunnel 2D décrit dans la partie 2 pour rendre compte du courant. Les paramètres clés conditionnant la transition tunnel sont :

- $\phi_{\text{IL}}$  : hauteur de barrière de l'oxyde interfacial  $\text{SiO}_2$  par rapport à la bande de conduction du Silicium,
- $\phi_{\text{HfO}_2}$  : hauteur de barrière du  $\text{HfO}_2$ ,
- $m_{\text{IL}}$  : masse tunnel des électrons dans l'oxyde interfacial,
- $m_{\text{HfO}_2}$  : masse tunnel des électrons dans le  $\text{HfO}_2$ .

L'extraction précise des paramètres tunnel des électrons dans le  $\text{HfO}_2$  s'effectue en ajustant  $\phi_{\text{HfO}_2}$  et  $m_{\text{HfO}_2}$  pour que le modèle tunnel rende compte des caractéristiques expérimentales en condition d'inversion. Les points suivants doivent néanmoins être pris en compte :

1. Les épaisseurs nominales données dans le Tableau 3.3 peuvent ne pas être rigoureusement égales aux épaisseurs physiques réelles, en raison de la variabilité et de la précision des procédés de dépôt ou à l'influence des budgets thermiques appliqués dans la suite du procédé. Les épaisseurs physiques  $t_{\text{IL}}$  et  $t_{\text{HfO}_2}$  ne sont connues que par l'intermédiaire de l'EOT, extrait par mesure  $C(V_g)$ . Dans le cas d'un bi-couche, nous rappelons l'expression de l'EOT :

$$\text{EOT} = \varepsilon_{\text{SiO}_2} \left( \frac{t_{\text{IL}}}{\varepsilon_{\text{IL}}} + \frac{t_{\text{high-}\kappa}}{\varepsilon_{\text{high-}\kappa}} \right), \quad (3.23)$$

avec  $\varepsilon_{\text{SiO}_2}$  la permittivité du  $\text{SiO}_2$  "idéale", et  $\varepsilon_{\text{IL}}$  et  $\varepsilon_{\text{high-}\kappa}$  les permittivités respectives de l'oxyde interfacial et du  $\text{HfO}_2$ , considérées inconnues. La seule connaissance de l'EOT est donc insuffisante pour juger de la valeur de ces 4 paramètres et des analyses complémentaires sont nécessaires pour les déterminer avec précision.

2. Implicitement abordé dans le point précédent, la nature de l'IL est également sujette à caution et est susceptible de s'écarter de celle du  $\text{SiO}_2$  en raison de l'épaisseur ultra-mince de la couche et d'une possible sous-stœchiométrie [3]. On rappelle qu'un consensus se dégage de la littérature sur la valeur des paramètres tunnel du  $\text{SiO}_2$ , à savoir  $\phi_{\text{SiO}_2} = 3,1\text{eV}$ ,  $m_{\text{SiO}_2} = 0,5m_0$  et une permittivité  $\varepsilon_{\text{SiO}_2} = 3,9\varepsilon_0$ . Mais une mauvaise prise en compte de la nature réelle de l'IL est susceptible de fausser l'extraction de paramètres  $\text{HfO}_2$ .
3. La modélisation tunnel doit être comparée à un courant de grille de type tunnel, et donc à basse température. Ce point peut sembler évident mais de nombreuses études extraient les paramètres tunnel à partir de caractéristiques de courant de grille à température ambiante, pour lesquelles une composante assistée par pièges est susceptible d'être le mécanisme de conduction prédominant [61]. L'étude de l'activation thermique du courant dans un empilement high- $\kappa$  prend dès lors tout son sens (paragraphe 3).

- Enfin, la cristallinité du HfO<sub>2</sub> dépend de son épaisseur [62] : amorphe dans le cas de couches ultra-minces, il cristallise dans une phase monoclinique quand son épaisseur dépasse environ 3,8nm (d'après [63]). Cette valeur est certes fortement dépendante du procédé de dépôt utilisé mais donne une bonne indication de l'ordre de grandeur du changement de phase. Pour l'empilement le plus épais ( $t_{\text{HfO}_2} = 4,5\text{nm}$ ), une modification des paramètres du matériau est donc susceptible d'être observée.

Ces remarques expliquent l'importante dispersion des paramètres tunnel HfO<sub>2</sub> relevés dans la littérature, illustrée dans la Figure 3.25. Le but de notre étude est donc d'aboutir à une meilleure extraction de ces paramètres tunnel grâce à la prise en compte des points précédemment cités.

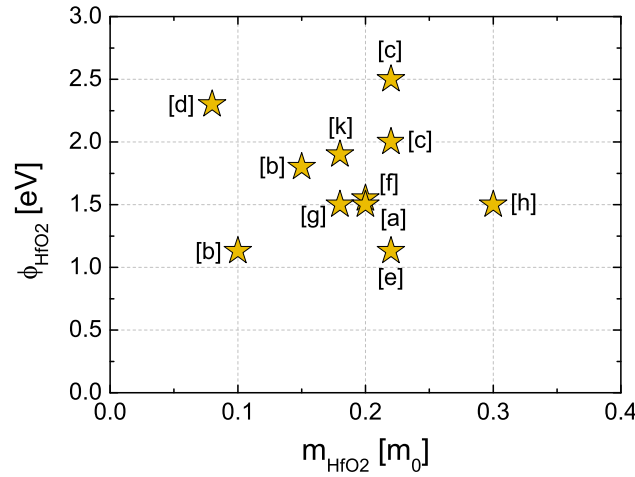


FIGURE 3.25 – Paramètres tunnel  $m_{\text{HfO}_2} / \phi_{\text{HfO}_2}$  relevés dans la littérature (a : [64], b : [6], c : [65], d : [66], e : [46], f : [67], g : [29], h : [68], k : [69]).

#### 4.1 Extraction des épaisseurs physiques

La seule connaissance de l'EOT d'un empilement bi-couche ne permet pas de caractériser précisément les épaisseurs physiques réelles de chaque matériau ainsi que leurs permittivités respectives (cf. Equation 3.23). Seule l'utilisation de structures nMOS différant soit par leurs épaisseurs d'IL soit par leurs épaisseurs de HfO<sub>2</sub> permet d'extraire précisément les permittivités et d'en déduire les épaisseurs physiques selon la méthodologie qui est exposée dans ce paragraphe.

Nous faisons tout d'abord l'hypothèse que les épaisseurs  $t_{\text{HfO}_2}$  réelles sont égales aux valeurs nominales données dans le Tableau 3.3. Un dépôt de type ALD est en effet considéré conforme à la valeur demandée car déposé mono-couche atomique par mono-couche atomique.

Cette hypothèse permet d'extraire la permittivité du HfO<sub>2</sub> ( $\epsilon_{\text{HfO}_2}$ ) en traçant

#### 4. Extraction de paramètres en régime d'inversion

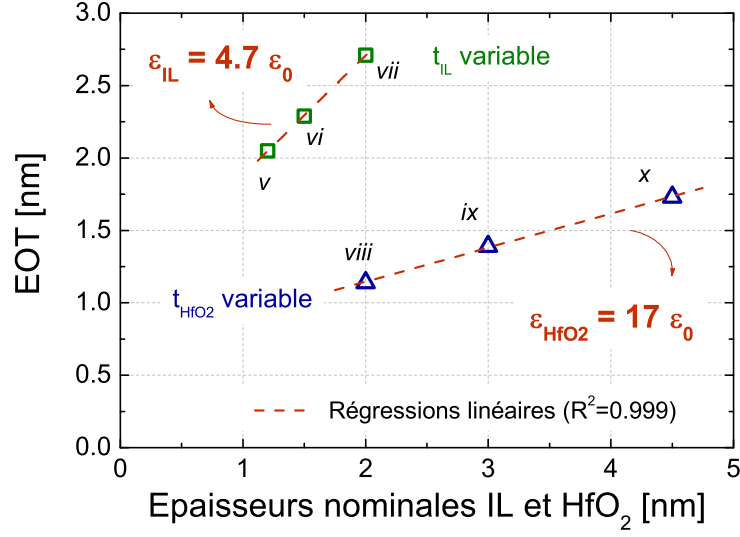


FIGURE 3.26 – Extraction de la permittivité diélectrique du  $\text{HfO}_2$  et de l'oxyde interfacial réalisé par croissance RTO.

l'EOT de l'empilement en fonction de l'épaisseur physique  $t_{\text{HfO}_2}$  (Figure 3.26). Une valeur  $\varepsilon_{\text{HfO}_2} = 17\varepsilon_0$  est obtenue, différant de la valeur théorique attendue (entre 20 et 25 selon les études [1]). La faible connaissance de ce matériau et de son comportement une fois intégré dans un empilement de grille souligne donc la nécessité d'une extraction expérimentale de la permittivité, et justifie l'étude d'empilements présentant des variantes d'épaisseur.

La même méthode appliquée aux empilements  $v$ ,  $vi$  et  $vii$  (différentes épaisseurs d'oxyde interfacial) donne une permittivité de l'oxyde interfacial  $\varepsilon_{\text{IL}} = 4,7\varepsilon_0$  dans ces 3 dispositifs. Damlencourt et al. [3] ont montré que dans un empilement high- $\kappa$ , l'oxyde interfacial  $\text{SiO}_2$  pouvait présenter une sous-stœchiométrie  $\text{SiO}_x$  : l'IL est ainsi susceptible d'avoir une permittivité se rapprochant de celle du Silicium<sup>8</sup>, et donc supérieure à celle du  $\text{SiO}_2$  pur. Ce comportement n'est néanmoins attendu que dans le cas d'un oxyde interfacial ultra-mince conventionnel (entre 5 et 8 Å), réalisé durant le nettoyage chimique du substrat Silicium avant le dépôt high- $\kappa$  (cas des dispositifs  $viii$ ,  $ix$  et  $x$  par exemple). Les épaisseurs  $t_{\text{IL}}$  des empilements  $v$ ,  $vi$  et  $vii$  ont volontairement été contrôlées par croissance thermique RTO, et présentent des valeurs nominales comprises entre 1,2 et 2 nm. Dans ce cas, la valeur expérimentale de la permittivité obtenue, caractéristique d'une sous-stœchiométrie des oxydes, peut sembler suspecte.

Pour vérifier la pertinence de l'hypothèse  $t_{\text{nominale}} = t_{\text{réelle}}$  dans ce cas précis, des observations TEM (*Transmission Electron Spectroscopy* : microscopie électronique en transmission) ont été réalisées sur les dispositifs  $v$  ( $t_{\text{IL}} = 1,2\text{nm}$ ,  $t_{\text{HfO}_2} = 3\text{nm}$ ) et  $vii$  ( $t_{\text{IL}} = 2\text{nm}$ ,  $t_{\text{HfO}_2} = 3\text{nm}$ ). Les 2 observations, représentées Figure 3.27,

8. On rappelle que  $\varepsilon_{\text{Si}} = 12\varepsilon_0$

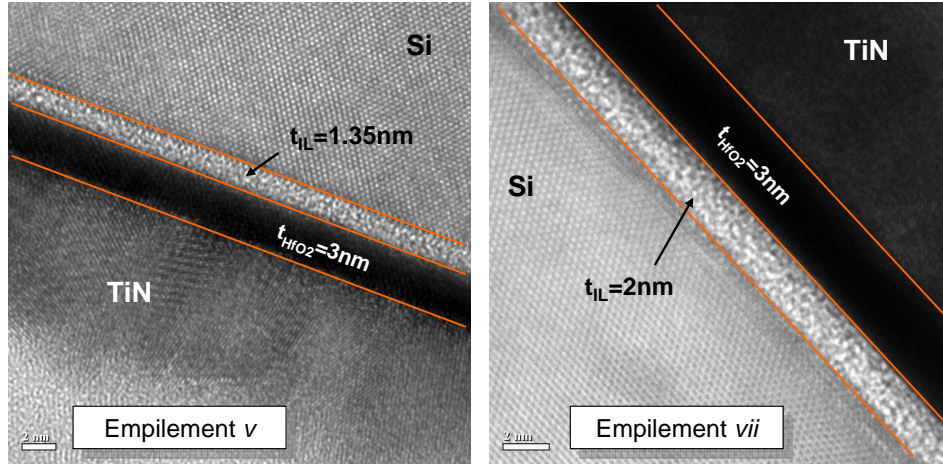


FIGURE 3.27 – Observations TEM des empilements *v* (épaisseurs nominales  $t_{\text{IL}} = 1,2\text{nm}$  et  $t_{\text{HfO}_2} = 3\text{nm}$ ) et *vii* (épaisseurs nominales  $t_{\text{IL}} = 1,2\text{nm}$  et  $t_{\text{HfO}_2} = 3\text{nm}$ ).

confirment le bon contrôle du dépôt ALD de l'oxyde  $\text{HfO}_2$ , dont l'épaisseur réelle est conforme à la valeur nominale attendue. En revanche, les épaisseurs réelles d'oxyde interfacial montrent un comportement différent selon l'épaisseur nominale initialement visée : sur l'empilement *vii*, une épaisseur  $t_{\text{IL}} = 2\text{nm}$  est mesurée, conformément aux attentes, alors que l'empilement *v* montre une recroissance d'oxyde de  $1,2\text{nm}$  (épaisseur visée) à environ  $1,35\text{nm}$  (aux incertitudes de mesure près).

Le mécanisme à l'origine de cette recroissance est illustré dans la Figure 3.28 : le  $\text{HfO}_2$  joue le rôle d'une source de radicaux  $-\text{OH}$ , radicaux qui transitent dans l'IL durant le recuit post-dépôt et oxydent la surface du substrat Silicium, ce qui conduit à une recroissance d'oxyde [3]<sup>9</sup>. L'épaisseur initiale d'oxyde interfacial conditionne le transport des atomes d'oxygène : dans le cas d'un IL épais, la source d'oxygène est trop éloignée de l'interface Si - IL, justifiant l'absence de recroissance (cas de l'empilement *vii*).

Les observations TEM contredisent donc l'approximation  $t_{\text{IL,nominale}} = t_{\text{IL,réelle}}$  et remettent en cause la valeur  $\varepsilon_{\text{IL}} = 4,7\varepsilon_0$  déduite de cette hypothèse. En considérant non plus les épaisseurs nominales mais celles mesurées par TEM pour l'extraction de  $\varepsilon_{\text{IL}}$ , une valeur égale à environ  $3,8\varepsilon_0$  est trouvée, très proche de la valeur standard  $\varepsilon_{\text{SiO}_2} = 3,9\varepsilon_0$ . Dans la suite de ce chapitre, nous considérerons donc que l'oxyde interfacial épais des empilements *v*, *vi* et *vii* est du  $\text{SiO}_2$  "pur" et donc que  $\varepsilon_{\text{IL}} = \varepsilon_{\text{SiO}_2} = 3,9\varepsilon_0$ . Nous étendons ce résultat aux dispositifs  $\text{SiO}_2$  RTO - Poly et  $\text{SiO}_2$  RTO - TiN pour lesquels nous considérons donc que l'EOT est égale à l'épaisseur physique d'oxyde de Silicium (empilements *i*, *ii*, *iii* et *iv*).

Les observations TEM réalisées sur les empilements présentant une épaisseur nominale constante  $t_{\text{IL}} = 0,8\text{nm}$  (empilements *viii*, *ix* et *x*) ont également montré

9. On notera que ce mécanisme favorise l'apparition de lacunes d'oxygène, dégradant la mobilité et augmentant le nombre de pièges dans le  $\text{HfO}_2$  [70].

#### 4. Extraction de paramètres en régime d'inversion

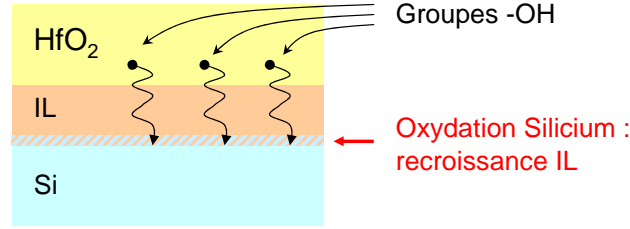


FIGURE 3.28 – Mécanisme de recroissance de l’oxyde interfacial dans un empilement IL -  $\text{HfO}_2$  - TiN. La recroissance est d’autant plus importante que l’épaisseur initiale d’IL est mince.

un écart entre épaisseur visée et épaisseur réelle (mesurée entre 0,9 et 1nm). Sur ces empilements, nous déduisons une permittivité  $\varepsilon_{\text{IL}} = 5\varepsilon_0$ , cohérente avec une nature sous-stœchiométrique  $\text{SiO}_x$  de la couche interfaciale.

Les permittivités extraites ( $\varepsilon_{\text{HfO}_2} = 17\varepsilon_0$ ,  $\varepsilon_{\text{IL,RTO}} = 3,9\varepsilon_0$  et  $\varepsilon_{\text{IL,chimique}} = 5\varepsilon_0$ ) et la connaissance des épaisseurs réelles du  $\text{HfO}_2$  permettent donc de déduire précisément les épaisseurs physiques d’oxyde interfacial à partir des EOT extraits par mesures  $C(V_g)$  (cf. Equation 3.23, page 95). L’ensemble des épaisseurs physiques utilisées par la suite pour la modélisation du courant de grille est résumé dans le Tableau 3.4.

Dispositif	$\varepsilon_{\text{IL}} (\varepsilon_0)$	$\varepsilon_{\text{HfO}_2} (\varepsilon_0)$	Epaisseur $t_{\text{IL}}$ (nm)		Epaisseur $t_{\text{HfO}_2}$ (nm)	
			Nominale	Réelle	Nominale	Réelle
<i>i</i>	3,9	×	1,5	1,78	×	×
<i>ii</i>	3,9	×	2,5	2,62	×	×
<i>iii</i>	3,9	×	1,5	1,56	×	×
<i>iv</i>	3,9	×	2,5	2,61	×	×
<i>v</i>	3,9	17	1,2	1,36	3,0	3,0
<i>vi</i>	3,9	17	1,5	1,60	3,0	3,0
<i>vii</i>	3,9	17	2,0	2,02	3,0	3,0
<i>viii</i>	5	17	0,8	0,87	2,0	2,0
<i>ix</i>	5	17	0,8	0,90	3,0	3,0
<i>x</i>	5	17	0,8	0,88	4,5	4,5

TABEAU 3.4 – Epaisseurs physiques “réelles” des couches diélectriques caractérisées.

#### 4.2 Extraction des paramètres tunnel de l’empilement

L’extraction des paramètres tunnel s’appuie sur la comparaison entre caractéristique expérimentale  $I_g(V_g)$  d’un empilement de grille et modélisation du courant de grille. Les paramètres  $N_a$  (niveau de dopage du Silicium),  $V_{\text{FB}}$  et les épaisseurs



physiques des matériaux diélectriques, grandeurs nécessaires à cette modélisation, sont pleinement connus et extraits grâce à la caractéristique expérimentale  $C(V_g)$ .

Dans cette partie, nous cherchons à rendre compte de l'ensemble des caractéristiques  $I_g(V_g)$  à l'aide d'un modèle tunnel 2D. Pour s'affranchir de toute composante thermiquement assistée, seules les caractéristiques mesurées à basse température (80K) seront considérées. L'objectif est ici d'arriver à rendre compte du courant dans les différents empilements à l'aide d'un unique jeu de paramètres tunnel, et ce afin de préserver et garantir la cohérence souhaitée lors de la réalisation des échantillons (procédé de dépôt HfO<sub>2</sub> identique sur tous les empilements).

Le modèle tunnel présenté dans la partie 2 a tout d'abord été validé sur les 2 empilements SiO<sub>2</sub> RTO - Polysilicium. La Figure 3.29 montre l'excellent accord entre l'expérience et la simulation à 80K comme à 400K, en considérant que l'EOT est égal à l'épaisseur physique de SiO<sub>2</sub>. L'absence d'activation thermique observée dans le paragraphe précédent était donc bien caractéristique d'un transport tunnel dans l'oxyde et non d'un transport TAT élastique assisté par des pièges profonds. Les paramètres tunnel utilisés sont les paramètres standards du SiO<sub>2</sub>, à savoir  $m_{\text{SiO}_2} = 0,5m_0$  et  $\phi_{\text{SiO}_2} = 3,1\text{eV}$ .

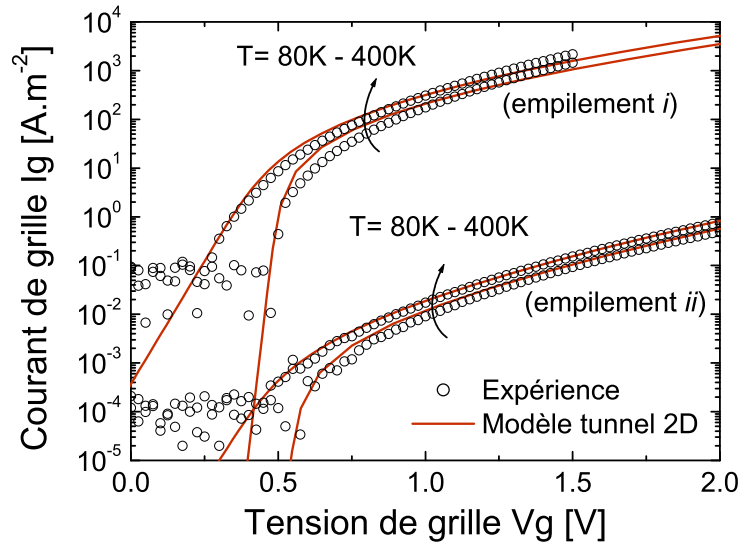


FIGURE 3.29 – Courant de grille expérimental et simulé des empilements SiO<sub>2</sub> - Polysilicium (*i* et *ii*). Un modèle tunnel avec  $m_{\text{SiO}_2} = 0,5m_0$  et  $\phi_{\text{SiO}_2} = 3,1\text{eV}$  rend bien compte du transport de 80 à 400K.

Ces paramètres, obtenus pour des oxydes RTO d'épaisseurs comprises entre 1,5 et 2,5nm, peuvent être utilisés pour rendre compte du transport dans les oxydes d'interface RTO des empilements *v*, *vi* et *vii*. Dans ces 3 empilements, seuls les paramètres tunnel du HfO<sub>2</sub> sont donc désormais inconnus. La comparaison expérience - modèle tunnel à basse température (voir Figure 3.30) permet de conclure à un mécanisme de type tunnel à basse température et d'extraire les valeurs suivantes :

#### 4. Extraction de paramètres en régime d'inversion

$m_{\text{HfO}_2} = 0,165m_0$  et  $\phi_{\text{HfO}_2} = 1,9\text{eV}$ . Ces 2 paramètres sont l'unique couple de paramètres tunnel rendant compte de l'expérience et ont été identifiés de manière indépendante : alors qu'une variation de la masse tunnel induit un décalage vertical de la courbe  $I_g(V_g)$  simulée, un changement de hauteur de barrière n'a d'influence que sur la pente de cette même caractéristique.

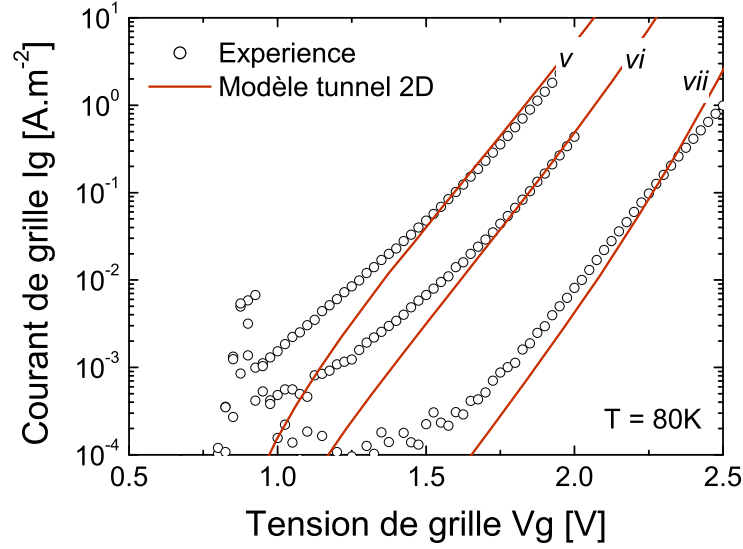


FIGURE 3.30 – Courant de grille expérimental et simulé des empilements IL -  $\text{HfO}_2$  -  $\text{TiN}$  (*v*, *vi* et *vii*) avec différentes épaisseurs d'IL RTO. Un modèle tunnel avec  $m_{\text{IL}} = 0,5m_0$ ,  $\phi_{\text{IL}} = 3,1\text{eV}$ ,  $m_{\text{HfO}_2} = 0,165m_0$  et  $\phi_{\text{HfO}_2} = 1,9\text{eV}$  rend bien compte du transport à 80K.

L'utilisation du même procédé de dépôt  $\text{HfO}_2$  dans l'ensemble des empilements étudiés nous conduit à utiliser les mêmes paramètres  $\text{HfO}_2$  pour rendre compte des niveaux de courant des empilements *viii*, *ix* et *x* (variantes de  $t_{\text{HfO}_2}$ ). Dans ce cas précis, seuls les paramètres tunnel de l'IL chimique, sous-stœchiométrique et ultra-mince, sont désormais inconnus. L'extraction de ces paramètres (voir Figure 3.31) donne curieusement des paramètres tunnel similaires à ceux du  $\text{SiO}_2$  "idéal".

Quelques remarques sur l'ajustement expérience - théorie dans le cas de ces 3 empilements :

- L'oxyde d'interface sous-stœchiométrique des empilements *viii*, *ix* et *x* présente des paramètres tunnel égaux à ceux du  $\text{SiO}_2$ . Ce résultat surprenant, et non cohérent avec la valeur  $\varepsilon_{\text{IL}} = 5\varepsilon_0$  précédemment extraite, peut s'expliquer par une erreur lors de l'évaluation de l'épaisseur d'IL à partir des observations TEM (erreur inhérente à ce type de mesure). Considérer une épaisseur d'IL supérieure de 1 à  $2\text{\AA}$  à la valeur que nous avons utilisé conduirait à extraire des paramètres tunnel plus faibles, et donc plus cohérents avec la nature  $\text{SiO}_x$  du matériau.

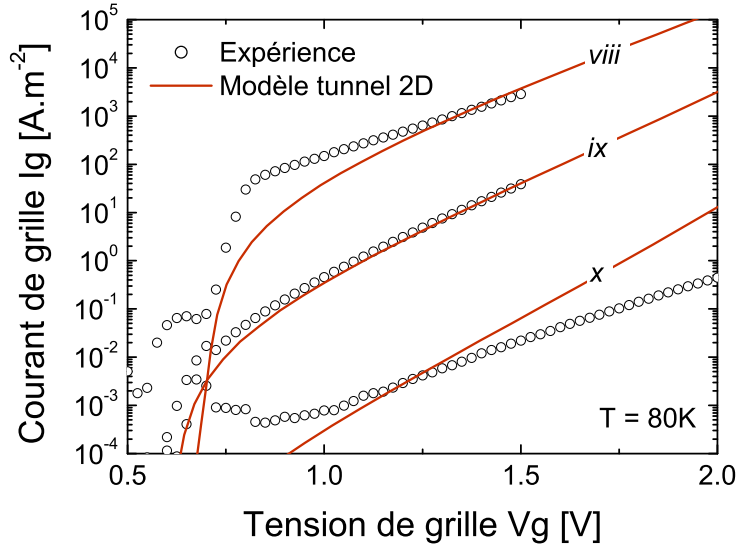


FIGURE 3.31 – Courant de grille expérimental et simulé des empilements IL - HfO<sub>2</sub> - TiN (*viii*, *ix* et *x*) avec différentes épaisseurs de HfO<sub>2</sub>. Un modèle tunnel avec  $m_{\text{IL}} = 0,5m_0$ ,  $\phi_{\text{IL}} = 3,1\text{eV}$ ,  $m_{\text{HfO}_2} = 0,165m_0$  et  $\phi_{\text{HfO}_2} = 1,9\text{eV}$  permet de rendre compte des niveaux de courant à 80K.

- Une des difficultés majeures est de considérer les mêmes paramètres tunnel HfO<sub>2</sub> pour l'ensemble des empilements high- $\kappa$ . Pour chaque caractéristique, un meilleur ajustement serait certes possible mais avec le risque de perdre la cohérence de l'étude entre les différents empilements et conduirait à reproduire la dispersion observée dans la littérature pour ces paramètres.
- L'ajustement est particulièrement bon pour l'empilement *ix* ( $t_{\text{HfO}_2} = 3\text{nm}$ ). Les paramètres HfO<sub>2</sub>, initialement extraits sur les empilements présentant une épaisseur  $t_{\text{HfO}_2} = \text{cte} = 3\text{nm}$ , reproduisent donc logiquement le transport dans cet empilement. Dans le cas de l'empilement épais (dispositif *x*,  $t_{\text{HfO}_2} = 4,5\text{nm}$ ), l'écart observé entre théorie et expérience peut à la fois être caractéristique d'un transport TAT élastique à basse température (et donc non reproduit par un modèle tunnel) ou un changement de phase cristallographique, entraînant un changement des paramètres du matériau. A ce stade de l'étude, nous penchons plutôt pour cette dernière hypothèse. En effet, la présence d'un régime TAT élastique induirait une composante additionnelle au courant tunnel, alors qu'à fort champ, on observe que le courant expérimental reste inférieur à cette seule composante tunnel. Nous laissons donc volontairement cette question en suspens car seules des données de caractérisation physique statuant sur la phase du HfO<sub>2</sub> permettraient de conclure plus clairement.

## 4. Extraction de paramètres en régime d'inversion

---

### 4.3 Conclusions

Cette étude a tout d'abord validé l'utilisation d'un modèle tunnel 2D pour rendre compte du courant de grille en régime d'inversion dans des empilements  $\text{SiO}_2$  - Polysilicium. Le modèle développé reproduit fidèlement les caractéristiques  $I_g(V_g)$  à l'aide des paramètres tunnel standards du  $\text{SiO}_2$ .

Lors de l'étude des empilements IL -  $\text{HfO}_2$  - TiN, l'apport de caractérisations physiques complémentaires (observations TEM) s'est révélé indispensable pour caractériser la nature de l'oxyde interfacial. Réalisé par croissance RTO, il présente un comportement  $\text{SiO}_2$  "pur" dans des gammes d'épaisseur comprises entre 1,2 et 2nm. Néanmoins, dans des empilements high- $\kappa$  présentant un faible EOT, cet oxyde d'interface est ultra-mince et réalisé durant le nettoyage chimique du substrat : il présente alors une sous-stoechiométrie  $\text{SiO}_x$ , conduisant à une permittivité  $\epsilon_{\text{IL}}$  plus importante (tendant vers  $\epsilon_{\text{Si}} = 12\epsilon_0$ ), voire des paramètres tunnel plus faibles.

La connaissance de l'oxyde interfacial des différents empilements a alors permis d'aboutir à un consensus sur les paramètres tunnel  $\text{HfO}_2$  :  $m_{\text{HfO}_2} = 0,165m_0$  et  $\phi_{\text{HfO}_2} = 1,9\text{eV}$ . Dans la moyenne des valeurs de la littérature (voir Figure 3.25, page 96), ces paramètres peuvent être considérés comme caractéristiques du  $\text{HfO}_2$  ALD après recuit à  $600^\circ\text{C}$ . Ils permettent de rendre compte du transport dans les empilements testés, à l'exception du dispositif présentant une épaisse couche high- $\kappa$  de 4,5nm. Pour ce cas particulier, nous suspectons une cristallisation du  $\text{HfO}_2$ , changement de phase induisant un changement des paramètres tunnel du matériau.

## 5 Extraction de paramètres en régime d'accumulation

### 5.1 Préambule

L'étude du transport en régime d'inversion nMOS a permis l'extraction des paramètres tunnel des électrons dans l'IL et le diélectrique high- $\kappa$ . En régime d'accumulation, l'absence d'activation thermique du courant de grille permet de supposer que le transport est assuré par les trous confinés dans la couche d'accumulation (cf. paragraphe 3), et non par un transport d'électrons 3D depuis la grille métallique vers la bande de conduction du Silicium.

Dans ce paragraphe, nous cherchons dans un premier temps à vérifier la validité de cette hypothèse en comparant les caractéristiques électriques des empilements HfO<sub>2</sub> (*v*, *vi*, *vii*, *viii*, *ix* et *x*) à la simulation des composantes *J2D<sub>BVh</sub>* et *J3D<sub>METe</sub>*. La modélisation du courant de trous fait intervenir les paramètres tunnel suivant (également indiqués dans la Figure 3.32) :

- $\phi_{h,IL}$  : hauteur de barrière vue par les trous accumulés, correspondant à la discontinuité d'énergie potentielle entre la bande de valence du Silicium et celle de l'IL,
- $\phi_{h,HfO_2}$  : hauteur de barrière du HfO<sub>2</sub> vue par les trous,
- $m_{h,IL}$  : masse tunnel des trous dans l'oxyde interfacial,
- $m_{h,HfO_2}$  : masse tunnel des trous dans le HfO<sub>2</sub>.

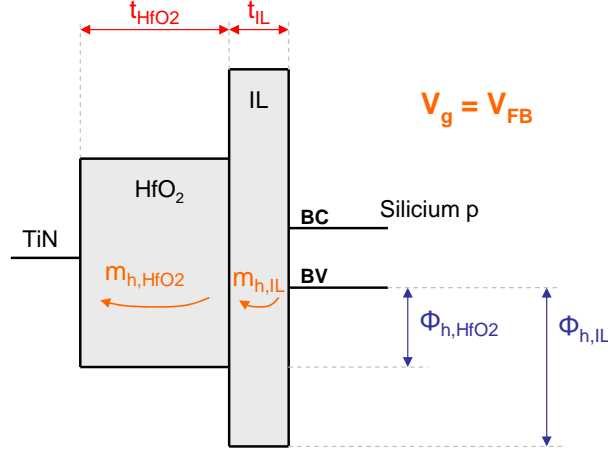


FIGURE 3.32 – Représentation schématique des paramètres tunnel des trous de la bande de valence du Silicium.

Nous investiguons dans un premier temps le comportement du courant en accumulation des empilements *v*, *vi* et *vii* (variantes de *t<sub>IL</sub>*), pour lesquels l'oxyde d'interface est du SiO<sub>2</sub> considéré "idéal". Comme dans le paragraphe précédent, seules les caractéristiques à  $T = 80K$  sont considérées.

La volonté de réduire autant que possible le nombre de paramètres d'ajustement conduit à fixer les valeurs des hauteurs de barrière des trous : à l'aide des paramètres

## 5. Extraction de paramètres en régime d'accumulation

tunnel des électrons (extraits dans le paragraphe précédent), de la valeur du gap du Silicium, ainsi que ceux des diélectriques ( $E_{g,IL} = 9\text{ eV}$  [71] et  $E_{g,HfO_2} = 5,85\text{ eV}$  [72]), nous obtenons :

$$\begin{aligned}\phi_{h,IL} &= 4,78\text{ eV}, \\ \phi_{h,HfO_2} &= 2,83\text{ eV}\end{aligned}\tag{3.24}$$

Ces 2 paramètres fixés permettent d'être cohérents avec l'étude du transport d'électrons en inversion, et seules les masses tunnel des trous dans les diélectriques demeurent inconnues. Dans le chapitre 2, nous avons vu que les caractéristiques électriques  $C(V_g)$  sont reproduites par la résolution Poisson-Schrödinger en considérant une masse tunnel de trous  $m_{h,IL} = 0,5m_0$  pour rendre compte de la pénétration des fonctions d'onde dans l'IL (avec une description parabolique de la bande de valence du Silicium).

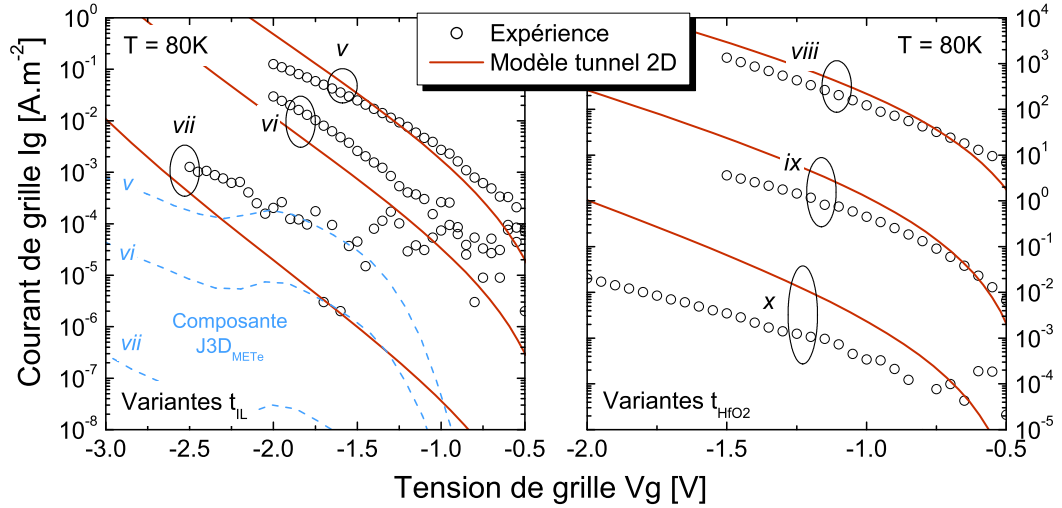


FIGURE 3.33 – Courant de grille expérimental et composantes simulées  $J2D_{BVh}$  des empilements IL -  $HfO_2$  - TiN. La composante  $J3D_{METe}$  est également représentée dans le cas des empilements  $v$ ,  $vi$  et  $vii$ . Les épaisseurs physiques d'empilements sont données dans le Tableau 3.4 et les paramètres tunnel des trous sont  $\phi_{h,IL} = 4,78\text{ eV}$ ,  $\phi_{h,HfO_2} = 2,83\text{ eV}$ ,  $m_{h,IL} = 0,5m_0$  et  $m_{h,HfO_2} = 0,06m_0$ . A noter qu'une description parabolique de la bande de valence du Silicium a été retenue dans la simulation Poisson-Schrödinger.

La Figure 3.33 montre que la composante  $J2D_{BVh}$  simulée avec cette valeur de masse tunnel dans l'IL et  $m_{h,HfO_2} = 0,06m_0$  permet certes de prédire l'ordre de grandeur du courant de grille, mais peine à reproduire fidèlement l'ensemble des caractéristiques sur toute la plage de tension  $V_g$  (courbes rouges). Les mêmes paramètres tunnel utilisés pour la simulation du courant dans les empilements présentant différentes épaisseurs de  $HfO_2$  ne permettent pas non plus de rendre totalement compte du courant.

La composante  $J_{3D_{METe}}$  des 3 empilements, simulée avec les paramètres des électrons extraits dans le paragraphe 4, est inférieure au courant de grille de plusieurs ordres de grandeur. On en conclut que dans un empilement high- $\kappa$ , le courant en accumulation est un courant associé aux trous confinés dans la bande de valence. Ce résultat est intéressant car il montre un comportement différent du cas d'un empilement SiO<sub>2</sub> : dans un tel dispositif, le courant en accumulation est assuré par le transport d'électrons depuis la grille vers la bande de conduction du Silicium [6].

Pour tenter d'obtenir un meilleur ajustement entre l'expérience et la théorie, nous avons également utilisé pour le calcul de la charge incidente les résultats de simulation Poisson-Schrödinger intégrant une approche  $k \cdot p$ . Nous avons souligné dans le chapitre 2 que l'ajustement des courbes  $C(V_g)$  nécessitait d'utiliser une masse tunnel dans l'IL  $m_{h,IL} = 1,2m_0$ . Avec une telle valeur de masse, les caractéristiques simulées chutent de plusieurs ordres de grandeurs, et même en ajustant la masse tunnel des trous dans le HfO<sub>2</sub> l'utilisation des résultats  $k \cdot p$  ne permet pas d'obtenir un meilleur ajustement<sup>10</sup>.

## 5.2 Structure de bande d'un diélectrique

Dans le cas du régime d'accumulation nMOS, la modélisation du transport tunnel apparaît donc nettement moins précise. Le modèle tunnel développé (paragraphe 2) repose sur une description parabolique de la relation de dispersion dans les oxydes IL et HfO<sub>2</sub>. Dans ce paragraphe, nous discutons la validité de cette approximation appliquée au calcul du courant de grille.

Dans un diélectrique d'épaisseur  $t_{ox}$ , la relation de dispersion  $k(E)$  suivant  $z$  est, avec l'épaisseur, la grandeur qui conditionne la valeur de la transparence tunnel :

$$T \propto e^{2i \cdot k \cdot t_{ox}} \quad (3.25)$$

La structure de bande d'un diélectrique est réelle dans les bandes de valence et de conduction, et imaginaire dans le gap. Cette part imaginaire caractérise l'évanescence des porteurs dans un diélectrique, et donc le courant tunnel.

La connaissance de la structure de bande d'un diélectrique est donc essentielle pour un calcul pertinent du courant tunnel. Comme dans le cas du Silicium, différentes méthodes numériques permettent le calcul de cette structure de bande (méthode des liaisons fortes, pseudo-potential, ab initio ou  $k \cdot p$ ). La Figure 3.34 montre la relation de dispersion du HfO<sub>2</sub> cristallin (phase cubique) calculée par Sacconi et al. [73] en utilisant la méthode des liaisons fortes.

La majorité des oxydes ultra-minces caractérisés dans le cadre de ces travaux de thèse sont amorphes et les approches précédemment citées pour le calcul de la structure de bande ne sont valables que dans l'hypothèse d'oxydes en phase cristalline. Néanmoins, Städele et al. soulignent dans [74] que le concept de relation de

10. Cette comparaison n'est pas représentée ici dans un souci de clarté.

## 5. Extraction de paramètres en régime d'accumulation

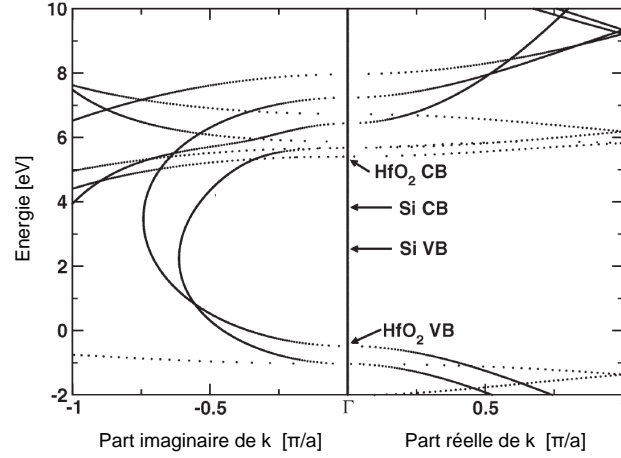


FIGURE 3.34 – Relation de dispersion du  $\text{HfO}_2$  en phase cubique, calculée par méthode des liaisons fortes (les données sont issues de [73]). La partie droite montre la structure de bande réelle des bandes de valence et de conduction (respectivement notées “ $\text{HfO}_2$  VB” et “ $\text{HfO}_2$  CB”) et “Si CB” et “Si VB” illustrent la position respective des bandes de conduction et de valence du Silicium. La partie gauche de la figure montre les bandes imaginaires dans le gap du diélectrique. Le nombre d’onde  $k$  s’exprime en unités de  $\pi/a$ , avec  $a$  le paramètre de maille du  $\text{HfO}_2$  égal à  $5,03\text{\AA}$ .

dispersion et les résultats obtenus par approche des liaisons fortes restent valables et donnent les bonnes tendances du comportement de diélectriques amorphes.

Néanmoins, les méthodes de calcul de relation de dispersion restent lourdes et compliquées à intégrer dans un simulateur de courant tunnel. De plus, il est exclu de considérer ces résultats de simulation comme étant la relation de dispersion “réelle” du diélectrique considéré : elle est en effet susceptible de différer de la théorie en raison d’une nature cristalline différente, dépendante de la méthode de dépôt utilisée, de l’épaisseur du diélectrique ou des matériaux adjacents. Des expressions analytiques sont donc nécessaires pour rendre compte de la relation de dispersion imaginaire dans le gap. Ces expressions doivent être fonctions de paramètres d’ajustement possédant un sens “physique” (masse tunnel par exemple) : ils permettent alors de comparer les propriétés de conduction de différents matériaux au travers d’un formalisme commun à la communauté scientifique.

Les méthodes d’approximation les plus communément utilisées sont les suivantes :

### 1. Approximation parabolique

Cette approche est celle que nous avons choisi d’utiliser jusqu’à présent et est la plus utilisée dans la littérature [6, 65, 66, 69]. La *masse tunnel* telle qu’elle a été définie dans les paragraphes précédents est la masse effective des porteurs dans le cadre de cette approximation. On rappelle l’expression de la relation de dispersion parabolique de la bande de conduction d’un diélectrique (exemple



d'un courant tunnel d'électrons) :

$$k_z(E) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_e E}, \quad (3.26)$$

avec  $m_e$  la masse tunnel (ou masse effective) et  $E$  l'énergie des électrons incidents suivant  $z$  par rapport à une référence choisie égale à la bande de conduction du diélectrique (la relation de dispersion est donc indirectement fonction de la hauteur de barrière vue par les électrons du Silicium). La même approche nous a également permis de décrire la bande de valence des diélectriques en définissant une autre relation parabolique, fonction d'une masse effective de trous  $m_h$  et de la hauteur de barrière vue par les trous (cf. paragraphe précédent, cas d'un courant tunnel de trous). La relation de dispersion parabolique est donc pleinement caractérisée par ces 2 paramètres tunnel : masse tunnel et hauteur de barrière.

Dans le Silicium, l'approximation parabolique a pour objectif de faciliter le calcul de la charge dans les bandes de valence et de conduction. Elle prend tout son sens dès lors que cette approche n'approxime que l'extremum de la relation de dispersion, dans lequel se situe l'essentiel de la charge à modéliser (voir Annexe A, page 189).

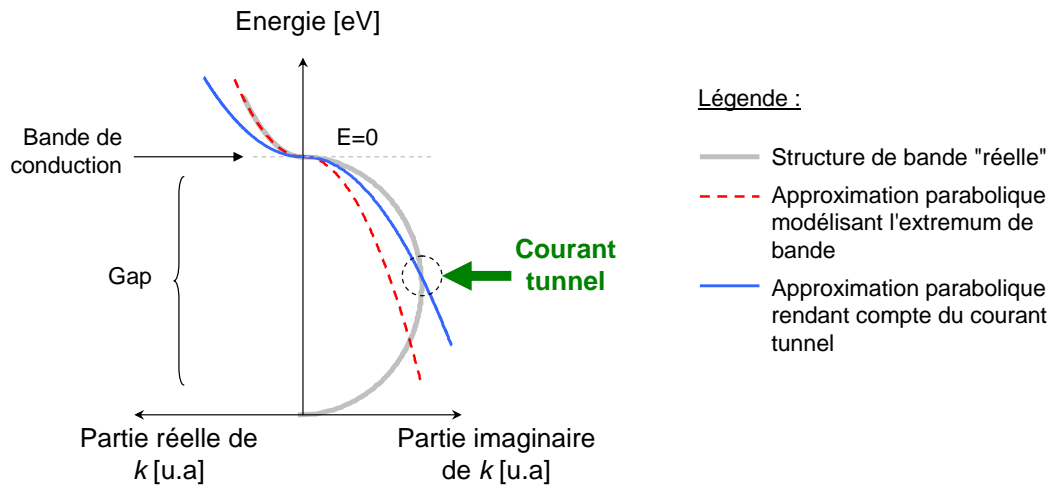


FIGURE 3.35 – Relation de dispersion schématisée d'un diélectrique, et approximations paraboliques rendant compte soit de l'extremum de bande de conduction, soit du courant tunnel à l'aide de masses tunnel appropriées.

Dans un diélectrique, l'ajustement de la masse effective parabolique vise non plus à modéliser un extremum de bande mais à rendre compte du courant tunnel d'un gaz de porteurs ayant une certaine énergie par rapport à la bande de conduction (dans l'exemple d'un courant tunnel d'électrons). La Figure 3.35 représente schématiquement la relation de dispersion d'un diélectrique, ainsi

## 5. Extraction de paramètres en régime d'accumulation

---

que les approximations paraboliques rendant compte 1/ de l'extremum de la bande de conduction et 2/ du courant tunnel de porteurs avec une énergie donnée. Dans ce dernier cas, la masse effective est ajustée de manière à ce que les relations de dispersion “exacte” et parabolique soient égale pour cette valeur d'énergie incidente.

Un point important à noter est que la masse effective rend compte du courant pour une valeur d'énergie donnée dans le référentiel du diélectrique (énergie constante par rapport à la bande de conduction ou la bande de valence du matériau). Dans un empilement MOS, le diélectrique est soumis à une chute de potentiel, et les porteurs transitant dans la barrière trapézoïdale “explorent” différentes gammes d'énergie du diélectrique. Dans ce cas, l'approximation parabolique est susceptible de montrer ses limites.

Dans le paragraphe 4, nous avons défini les masses tunnel des électrons dans les diélectriques dans le cadre de l'approximation parabolique. Bien que reposant sur une approximation dont on peut discuter la pertinence, les valeurs de masses extraites permettent de rendre compte du courant de grille en inversion. Les difficultés rencontrées pour la modélisation du courant de trous en régime d'accumulation nMOS remettent néanmoins en cause cette description et soulignent l'écart à la parabolicité de la relation de dispersion.

### 2. Relation de Franz

Proposée en 1956 par W. Franz [75], cette relation rend compte à la fois du transport de trous et d'électrons au travers d'une unique masse  $m_f$  dite *de Franz* (contrairement à l'approche parabolique dans laquelle une masse tunnel par porteur est définie). On parle donc de relation de dispersion à deux bandes symétriques. Elle s'exprime en fonction du gap  $E_g$  du diélectrique par :

$$k_z(E) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_f E \left(1 - \frac{E}{E_g}\right)} \quad (3.27)$$

### 3. Relation non-symétrique

La structure de bande imaginaire dans le gap peut néanmoins présenter une dissymétrie. Pour en rendre compte, une relation dite *non-symétrique* est introduite [76], fonction de masses  $m_{ns,e}$  et  $m_{ns,h}$  (électrons et trous) qui pondèrent l'influence respective des structures de bandes de conduction et de valence sur la part imaginaire de la relation de dispersion :

$$k_z(E) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_{ns,e} E \left(1 - \frac{E}{E_g}\right)} \left[ \sqrt{1 - \left(1 - \frac{m_{ns,e}}{m_{ns,h}}\right) \frac{E}{E_g}} \right]^{-1} \quad (3.28)$$

Les relations de dispersion paraboliques, de Franz et non-symétrique sont représentées Figure 3.36 dans l'exemple du SiO<sub>2</sub>. En pratique, les intégrer dans la modélisation tunnel revient à considérer 2 masses tunnel paraboliques dépendantes

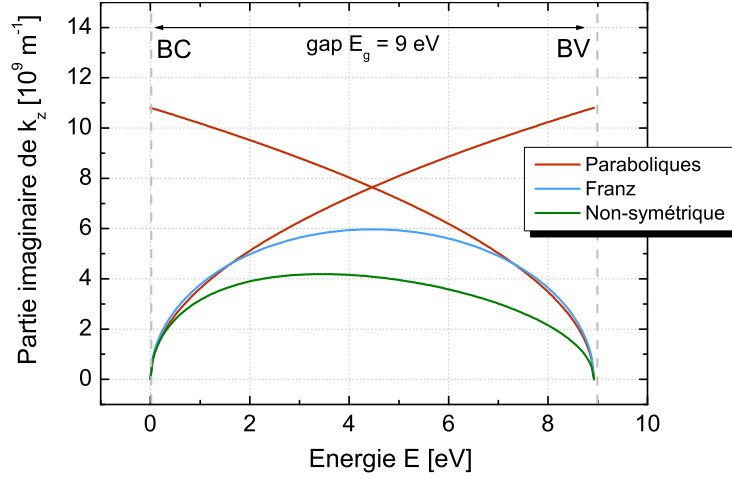


FIGURE 3.36 – Représentation des différentes relations de dispersion dans le gap du SiO<sub>2</sub>. Les masses tunnel utilisées dans chacun des cas sont  $m_e = m_h = 0,5m_0$  (cas parabolique),  $m_f = 0,61m_0$  (cas Franz) et  $m_{ns,e} = 0,5m_0$  et  $m_{ns,h} = 0,2m_0$  (cas non-symétrique). A noter que ces valeurs ne sont pas forcément représentatives des masses à utiliser pour rendre compte du courant de grille.

de l'énergie  $E$  des porteurs, selon la formule (exemple d'un courant tunnel d'électrons) :

$$m_e(E) = -\frac{\hbar^2 k_z(E)^2}{2E} \quad (3.29)$$

A noter que le passage d'une relation  $m_e(E)$  (avec une référence d'énergie égale à la bande de conduction du diélectrique) à une relation  $m_e(E_z)$  (référence d'énergie égale à la bande de conduction du Silicium) nécessite de prendre en compte le champ dans les oxydes et leurs hauteurs de barrière respectives.

Dans le cadre de ces travaux de thèse, nous cherchons à reproduire le courant de grille expérimental en utilisant un modèle physique précis, tout en limitant le nombre de paramètres d'ajustement. Il serait tentant de définir empiriquement de nouvelles structures de bande de l'IL et du HfO<sub>2</sub> pour chaque empilement, reproduisant fidèlement l'expérience<sup>11</sup>. Toute caractéristique  $I_g(V_g)$  trouverait certes un excellent accord avec la théorie, mais le risque serait alors d'occulter certains phénomènes physiques que l'on cherche à identifier (conduction par pièges, nature de l'oxyde interfacial, phase cristalline du high- $\kappa$ ).

Nous maintenons donc les conclusions faites dans le cas d'un courant tunnel d'électrons, à savoir la validité de l'approximation parabolique avec les masses tunnel extraites dans le paragraphe 4, approximation qui permet de rendre compte du courant dans de larges gammes d'épaisseurs diélectriques (excepté le cas  $t_{\text{HfO}_2} = 4,5\text{nm}$ ).

11. Cela reviendrait à définir empiriquement des masses tunnel paraboliques dépendantes de l'énergie  $m_e(E_z)$  et  $m_h(E_z)$ .

## 5. Extraction de paramètres en régime d'accumulation

Dans le cas du transport 2D de trous en accumulation, nous cherchons désormais à modéliser le courant à l'aide d'une relation de dispersion de type Franz, plus avancée que l'approche parabolique et présentant un nombre réduit de paramètres d'ajustement.

### 5.3 Extraction des masses tunnel Franz dans l'IL et le HfO<sub>2</sub>

La Figure 3.37 montre l'ajustement entre théorie et courant de grille des empilements high- $\kappa$  avec variantes de  $t_{\text{IL}}$  (figure de gauche) et  $t_{\text{HfO}_2}$  (figure de droite). L'ensemble des caractéristiques a été simulé avec des paramètres tunnel identiques :

- les hauteurs de barrière des trous sont les mêmes que celles définies en Figure 3.33,
- l'accord théorie-expérience est assuré en ajustant les masses de Franz dans le HfO<sub>2</sub> et l'IL, conduisant à des masses tunnel  $m_{f,\text{HfO}_2} = 0,22m_0$  et  $m_{f,\text{IL}} = 0,5m_0$ .

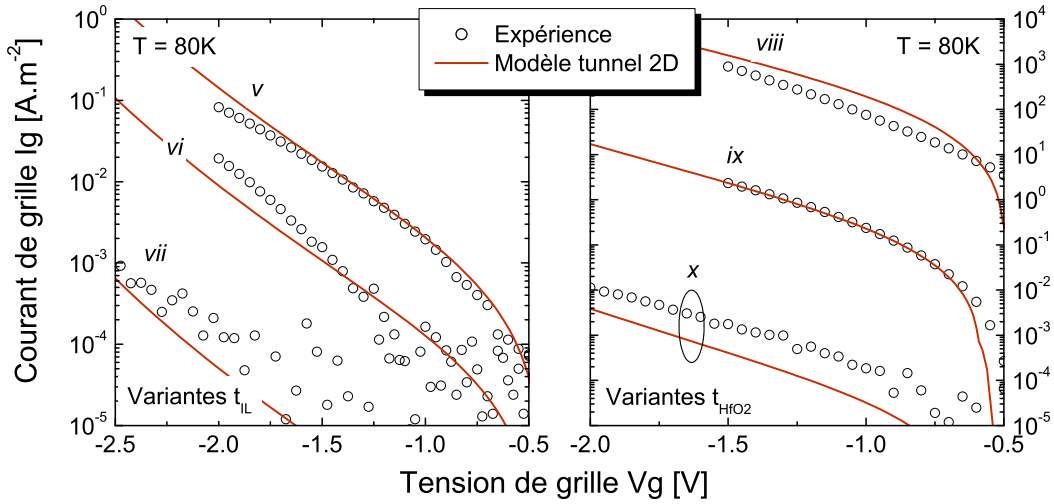


FIGURE 3.37 – Courant de grille expérimental et composantes simulées  $J2D_{\text{BVh}}$  des empilements IL - HfO<sub>2</sub> - TiN. Les épaisseurs physiques des empilements sont données dans le Tableau 3.4 et les paramètres tunnel des trous sont  $\phi_{h,\text{IL}} = 4,78 \text{ eV}$ ,  $\phi_{h,\text{HfO}_2} = 2,83 \text{ eV}$ ,  $m_{f,\text{IL}} = 0,5m_0$  et  $m_{f,\text{HfO}_2} = 0,22m_0$ .

En régime d'accumulation, il apparaît indispensable de s'affranchir d'une simple relation de dispersion parabolique de la bande de valence des diélectriques. Une relation de type Franz, plus proche de la structure de bande "exacte", permet un bien meilleur accord sur l'ensemble des gammes d'épaisseurs étudiées.

Le cas particulier de l'empilement  $x$  ( $t_{\text{HfO}_2} = 4,5 \text{ nm}$ ) est néanmoins une nouvelle fois souligné : l'hypothèse d'une modification structurale du HfO<sub>2</sub> épais, formulée dans le paragraphe 4, est susceptible d'expliquer l'écart entre la caractéristique expérimentale et la théorie tunnel avec relation de Franz. Des caractérisations physico-

chimiques complémentaires sont toutefois nécessaires pour étayer cette hypothèse.

De plus, la théorie de Franz peine à reproduire le courant de l'empilements *vi*. En observant la Figure 3.24 (page 93), on remarque que le courant en accumulation dans cette structure montre un comportement différent des empilements *v* et *vii*. On peut donc légitimement suspecter que le courant en accumulation n'est pas réellement intrinsèque à un empilement 1,5nm IL - 3nm HfO<sub>2</sub> - TiN.

## 6 Cohérence inversion - accumulation

Un ensemble de masses tunnel a donc été défini pour rendre compte du courant de grille dans différents empilements, en régime d'inversion (courant 2D d'électrons depuis la bande de conduction du Silicium) comme en régime d'accumulation (courant 2D de trous depuis la bande de valence du Silicium). Ces masses sont les paramètres de fonctions analytiques qui décrivent les relations de dispersion imaginaires des gaps de l'IL et du HfO<sub>2</sub>.

En inversion, les électrons transitent entre le milieu du gap et la bande de conduction des diélectriques. Dans cette zone, nous avons approximé les relations de dispersion à l'aide d'approches paraboliques de paramètres  $m_{e,IL} = 0,5m_0$  et  $m_{e,HfO_2} = 0,165m_0$ .

De même, en accumulation, les trous sont sensibles aux relations de dispersion des diélectriques entre le milieu du gap et les bandes de valence de l'IL et du HfO<sub>2</sub>. Dans chaque matériau, une approche de type Franz s'est avérée la plus pertinente pour décrire les relations de dispersion dans ces gammes d'énergie, avec les paramètres  $m_{f,IL} = 0,5m_0$  et  $m_{f,HfO_2} = 0,22m_0$ .

L'enjeu de ce paragraphe est de définir dans chaque matériau une relation de dispersion unique dans l'ensemble du gap, rendant à la fois compte du transport des électrons et des trous. Conformément aux résultats précédents, nous attendons qu'elles approchent une forme parabolique dans les gammes d'énergie accessibles aux électrons, et de type Franz pour les trous.

La Figure 3.38 montre la structure de bandes de l'empilement *vii* (2nm SiO<sub>2</sub> - 3nm HfO<sub>2</sub>) en condition de bandes plates ( $V_g = V_{FB}$ ) et en forte inversion ( $V_g = 2,5V$ ). Cette structure présente d'épaisses couches de diélectriques et donc de fortes chutes de potentiel à fort  $V_g$  : c'est donc dans cet empilement que la définition des relations de dispersion est la plus délicate, les gammes d'énergie accessibles aux porteurs y étant les plus étendues.

En inversion, les électrons sont particulièrement sensibles à la relation de dispersion comprise entre 1,6 et 3,1 eV dans l'IL (en prenant pour références les bandes de conduction des diélectriques), et entre 0 et 1,9 eV dans le HfO<sub>2</sub>. On remarque notamment que la transition Tunnel Direct - Fowler-Nordheim dans le HfO<sub>2</sub> ne sera visible que dans cet empilement pour une tension supérieure à  $V_g = 2,5V$ . Nous aborderons le cas particulier du régime Fowler-Nordheim dans HfO<sub>2</sub> dans le paragraphe 7.

De même, nous avons mis en évidence que les zones d'énergie vues par les trous s'étendent de 4,22 à 5,49 eV dans l'IL et de 3,02 à 4,73 eV dans le HfO<sub>2</sub> (toujours en prenant référence par rapport à la bande de conduction de chaque diélectrique).

La Figure 3.39 montre les relations de dispersion que nous avons indépendamment défini en inversion et en accumulation ainsi que les gammes d'énergie dans lesquelles les approches paraboliques et Franz se sont avérées pertinentes pour rendre compte du courant.

La modélisation précise de l'intégralité de la relation de dispersion dans le HfO<sub>2</sub> apparaît essentielle : en effet, dans les plages de tension de grille étudiées, les porteurs

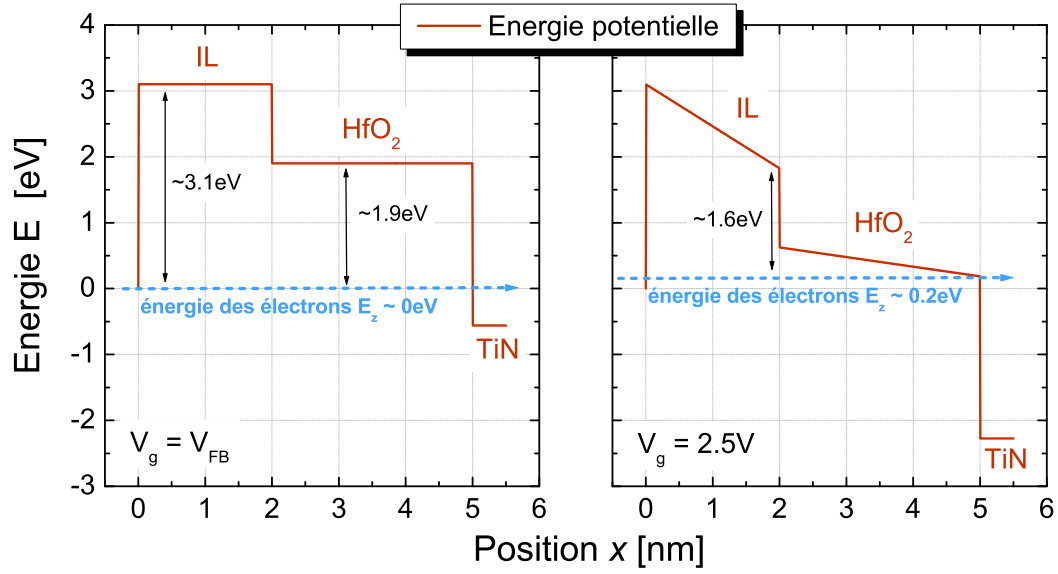


FIGURE 3.38 – Diagramme de bande de l'empilement *vii* (2nm SiO<sub>2</sub> - 3nm HfO<sub>2</sub>), représenté en régime de bandes plates et en forte inversion.

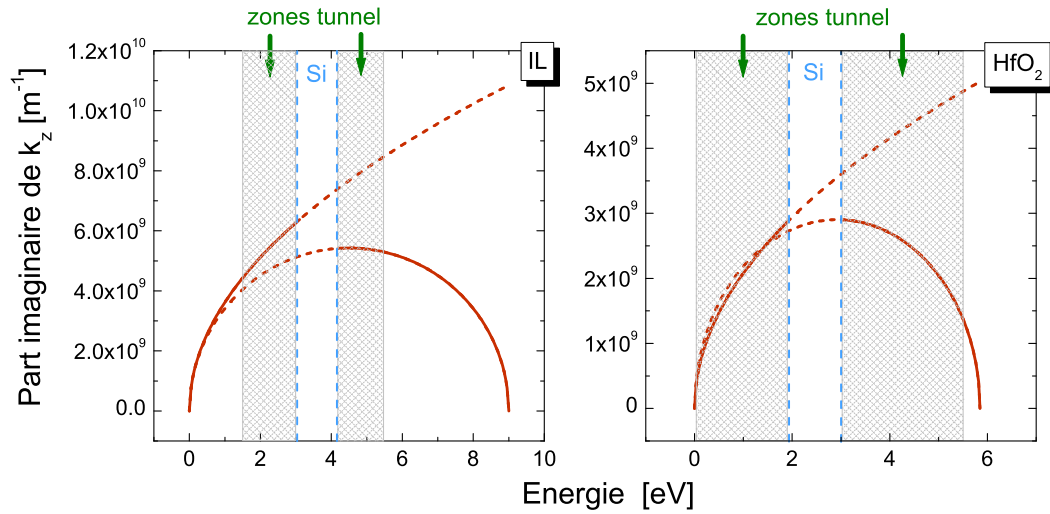


FIGURE 3.39 – Relations de dispersion paraboliques et de Franz dans l'IL et le HfO<sub>2</sub>. Les traits pointillés bleus illustrent la position du gap du Silicium et les zones grises sont les zones dans lesquelles transitent les porteurs en accumulation et en inversion dans l'empilement *vii*.

transitent dans quasiment tout le gap. Dans l'oxyde interfacial des 6 empilements étudiés, la gamme d'énergie maximale à considérer est nettement moins étendue : seules les zones en regard des bandes de conduction et de valence du Silicium sont

## 6. Cohérence inversion - accumulation

---

concernées par une modélisation précise de la structure de bande. De plus, les zones représentées concernent l'empilement *vii*. Dans un empilement conventionnel, un oxyde d'interface de quelques angströms ne présentera qu'une faible chute de potentiel, et la modélisation de sa relation de dispersion ne devra être pertinente que dans une gamme d'énergie encore plus faible.

L'analyse de la Figure 3.39 amène plusieurs remarques :

- Dans le  $\text{HfO}_2$  (figure de droite), l'approximation parabolique en inversion et l'approche de Franz en accumulation sont en bonne cohérence. De ces 2 approximations semble se dégager une structure de bande commune et symétrique, équivalente à une relation de Franz de paramètre  $m_{f,\text{HfO}_2} = 0,22m_0$ . Cette masse de Franz est celle que nous avons utilisé pour rendre compte du courant en accumulation et reproduit bien l'approximation parabolique de paramètre  $m_{e,\text{HfO}_2} = 0,165m_0$  dans une zone proche de la bande de conduction.
- Le cas de l'IL est sujet à caution (figure de gauche). Les relations parabolique et Franz représentées sont les uniques relations qui rendent compte du courant en inversion et en accumulation. Il semble néanmoins difficile de dégager une unique relation de dispersion à partir de ces 2 approches : rendre compte à la fois du courant en inversion et en accumulation nécessiterait d'être proche de l'approximation parabolique entre 0 et 3,1 eV et proche d'une relation de Franz entre 4,22 et 9 eV, entraînant alors une discontinuité de la relation de dispersion au niveau du gap du Silicium.

L'hypothèse la plus probable, selon nous, pour expliquer cette incohérence est une mauvaise prise en compte de la nature sous-stœchiométrique de l'oxyde d'interface ultra-mince des empilements *viii*, *ix* et *x* (variantes  $t_{\text{HfO}_2}$  avec  $t_{\text{IL}} = \text{cte}$ ). Tout au long de cette étude, nous avons expliqué le courant dans les différents IL (chimiques ou RTO) par un même jeu de paramètres tunnel. La seule donnée nous ayant permis de quantifier la sous-stœchiométrie de l'oxyde chimique est la mesure TEM de son épaisseur. Néanmoins, ce type de mesure présente une incertitude susceptible de se retrouver sur les paramètres tunnel de ce matériau <sup>12</sup>.

Nous concluons ce paragraphe en comparant la relation de dispersion du  $\text{HfO}_2$  obtenue dans le cadre de notre étude expérimentale avec celle obtenue par méthode des liaisons fortes (ou *tight bending*) par Sacconi et al. [73] <sup>13</sup>. Ces travaux démontrent que le  $\text{HfO}_2$  en phase cristalline cubique présente deux bandes imaginaires X et  $\Gamma$  qui assurent toutes deux le transport tunnel. Selon les auteurs, le courant suivant la direction  $\Gamma$  est néanmoins prépondérant, le nombre d'onde  $k_z$  étant plus faible dans cette direction que dans la direction X.

La Figure 3.40 montre un écart conséquent entre les relations que nous avons obtenu expérimentalement et les résultats de simulation *tight bending*. Seules les zones

---

12. Les mêmes interrogations avaient été exprimées après analyse des paramètres tunnel extraits en inversion (page 101).

13. Cette structure est représentée en Figure 3.34 (page 107).



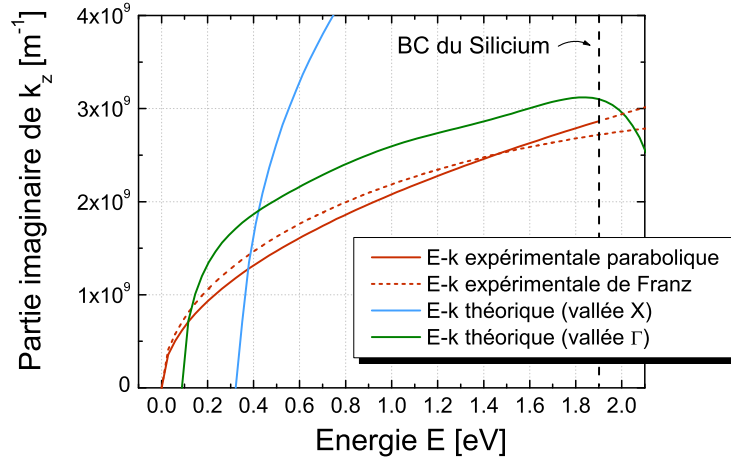


FIGURE 3.40 – Relations de dispersion paraboliques et de Franz HfO<sub>2</sub> obtenues expérimentalement comparées avec l’approche théorique proposée par Sacconi et al. [73].

accessibles aux électrons sont représentées, Sacconi et al. ne donnant une formulation analytique que dans cette gamme d’énergie. L’origine de cet écart s’explique par la structure “idéale” considérée dans les simulations *tight bending*, à savoir une structure cristalline Silicium n - HfO<sub>2</sub> cristallin - Silicium p fort différente du HfO<sub>2</sub> amorphe que nous avons caractérisé.

Nous soulignons donc la nécessité d’adopter une approche expérimentale pour l’étude du courant de grille, et notamment pour la définition des paramètres tunnel. Les nombreuses études théoriques de la littérature sont nécessaires et indispensables pour acquérir une bonne connaissance du comportement des matériaux, mais il est impossible de considérer les résultats de ces études dans une approche quantitative.

## 7 Régime Fowler-Nordheim dans HfO<sub>2</sub>

Nous avons mis en évidence dans le paragraphe précédent qu'un mécanisme Tunnel Direct explique la conduction à basse température dans l'ensemble des empilements et dans les plages de tension considérées (excepté le cas particulier  $t_{\text{HfO}_2} = 4,5\text{nm}$ ). Seul l'empilement *vii* atteint un régime de conduction Fowler-Nordheim au-delà d'une polarisation de grille  $V_g = 2,5\text{V}$  (Figure 3.38).

Des mesures complémentaires ont été effectuées sur cet empilement pour des tensions de grille plus importantes  $V_g > 2,5\text{V}$ . On attend donc un mécanisme de conduction reproduit par notre modèle de courant tunnel, incluant conjointement les transports Tunnel Direct et Fowler-Nordheim. La Figure 3.41 montre un fort désaccord entre théorie tunnel et expérience dans la gamme de tension pour laquelle un régime Fowler-Nordheim est attendu.

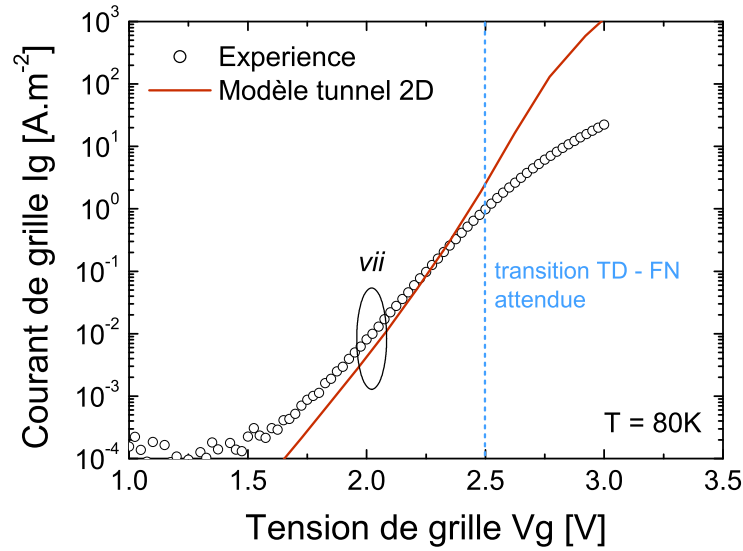


FIGURE 3.41 – Courant de grille expérimental à  $T = 80\text{K}$  de l'empilement *vii* ( $t_{\text{IL}} = 2\text{nm}$ ,  $t_{\text{HfO}_2} = 3\text{nm}$ ), comparé à la modélisation tunnel (les paramètres tunnel peuvent être retrouvés dans les commentaires de la Figure 3.30).

Comme prévu, la simulation de courant de grille montre une augmentation conséquente du courant dans cette zone, les porteurs transitant dans une barrière HfO<sub>2</sub> amincie par le champ électrique. Dans le paragraphe 1.2.1 (page 65), nous avons fait l'hypothèse d'une transparence égale à 1 quand le porteur se situe dans la bande de conduction du HfO<sub>2</sub> (régime thermoionique par exemple). Cela équivaut à supposer le transport ballistique dans la bande de conduction, c'est-à-dire un libre parcours moyen du porteur supérieur à l'épaisseur d'oxyde.

Valable dans le SiO<sub>2</sub> [17], nous remettons en question cette hypothèse dans le cas du HfO<sub>2</sub> : le désaccord observé entre théorie et expérience montre que la transparence dans la bande de conduction du HfO<sub>2</sub> n'est pas égale à 1 et que le

transport n'y est pas ballistique.

Le régime Fowler-Nordheim n'est donc pas atteint dans HfO<sub>2</sub> et semble laisser place à un transport caractéristique de la relation de dispersion dans la bande de conduction. Une étude poussée de la structure de bande réelle (dans le sens mathématique du terme) du HfO<sub>2</sub> est donc nécessaire pour étudier ce phénomène. A noter que cette observation s'inscrit dans le cadre d'une plus large campagne de mesures au sein du LETI visant à étudier la transition Tunnel Direct - Fowler-Nordheim dans HfO<sub>2</sub>. Elle est en cohérence avec ces résultats, dont certains peuvent notamment être trouvés dans [77].

## 8 Conclusions du chapitre 3

Dans ce chapitre, nous avons identifié, modélisé et simulé les composantes à l'origine du courant de grille dans un empilement nMOS de type IL - HfO<sub>2</sub> - grille métal TiN.

L'origine du courant de grille a tout d'abord été conjointement établie grâce à l'étude de la séparation de porteurs et à la comparaison entre les caractéristiques expérimentales et théoriques du courant de grille. Dans un empilement HfO<sub>2</sub>, il apparaît que le courant de grille est assuré par les électrons confinés provenant de la bande de conduction du Silicium en régime d'inversion ( $I_g = I_{sd} = J2D_{BCe}$ ). En accumulation, la conduction de trous confinés dans la bande de valence du Silicium explique le courant de grille ( $I_g = I_b = J2D_{BVh}$ ). Ce dernier résultat est particulièrement intéressant car il montre un comportement différent d'un empilement SiO<sub>2</sub> conventionnel : dans une telle structure, le courant de grille en accumulation nMOS est dû à un transport d'électrons depuis la grille vers la bande de conduction du Silicium.

Le mécanisme de conduction des 2 composantes 2D à l'origine du courant de grille est susceptible d'être de type tunnel (cas Tunnel Direct et Fowler-Nordheim) ou assisté par pièges (cas Poole-Frenkel ou TAT inélastique à haute température et TAT élastique à basse température). Un ensemble de dispositifs présentant différentes épaisseurs de HfO<sub>2</sub> ou d'oxyde interfacial (IL) a ainsi été caractérisé à différentes températures (de 80 à 400K). L'étude de l'activation thermique du courant de grille nous a permis de discriminer les différents mécanismes de conduction dans chaque type d'empilement :

- Le SiO<sub>2</sub> ne présente pas de pièges susceptibles d'assister le courant de grille. Le courant d'empilements SiO<sub>2</sub> - Polysilicium ou SiO<sub>2</sub> - TiN n'évolue en effet pas en fonction de la température, ce qui est caractéristique d'un transport de type tunnel dans ce matériau.
- Le diélectrique HfO<sub>2</sub> présente une bande de pièges uniformément répartis en son volume, et situés à environ 1 eV de sa bande de conduction. Ces pièges assistent le courant de grille en régime d'inversion dès lors que  $t_{HfO_2}$  est supérieur à 3 nm et la température à 300 K (mécanismes Poole-Frenkel ou TAT inélastique). Pour l'empilement présentant une épaisseur de 2 nm de high- $\kappa$ , le courant en inversion n'est pas activé en température, signe que le transport tunnel reste prépondérant par rapport à la composante assistée par pièges.
- En régime d'accumulation, le courant n'est pas thermiquement activé : l'absence de pièges en regard de la bande de valence du Silicium explique la prédominance d'un courant de type tunnel.
- Enfin, conformément aux observations faites dans le cas d'empilements SiO<sub>2</sub>, l'étude des dispositifs présentant différentes épaisseurs d'IL montre une activation thermique constante, uniquement dépendante de l'épaisseur de HfO<sub>2</sub> et synonyme d'un transport de type tunnel dans l'IL.

L'extraction des paramètres tunnel de l'oxyde d'interface et du HfO<sub>2</sub> nécessite dans un premier temps une bonne connaissance des épaisseurs physiques de ces matériaux. La seule connaissance de l'EOT est en effet insuffisante pour pleinement caractériser un bi-couche et des hypothèses complémentaires sont nécessaires.

L'utilisation d'un dépôt ALD pour le HfO<sub>2</sub> est un gage de précision et permet de considérer que les épaisseurs nominales de high- $\kappa$  sont égales aux épaisseurs réelles. Cette hypothèse a été confirmée par des observations TEM et la connaissance de ces épaisseurs nous a permis de déduire une permittivité du HfO<sub>2</sub>  $\epsilon_{\text{HfO}_2} = 17\epsilon_0$ .

L'apport de caractérisations physiques TEM s'est ensuite avéré indispensable à l'étude de l'IL : quand réalisé par croissance thermique RTO, et dans des gammes d'épaisseurs comprises entre 1,2 et 2nm, l'IL peut être considéré comme proche du SiO<sub>2</sub> et a donc une permittivité  $\epsilon_{\text{IL}} = \epsilon_{\text{SiO}_2} = 3,9\epsilon_0$ . Quand réalisé par nettoyage chimique, et pour une épaisseur proche de 8Å, l'oxyde d'interface présente une nature sous-stœchiométrique SiO<sub>x</sub>, de permittivité supérieure à celle du SiO<sub>2</sub> (environ  $5\epsilon_0$ ).

Les mesures TEM nous ont également permis de mettre en évidence une recroissance de l'oxyde d'interface durant le recuit post-dépôt du high- $\kappa$ . Cette recroissance est due à une oxydation du Silicium à l'interface Si - IL, oxydation causée par des groupes -OH provenant du HfO<sub>2</sub> et transitant dans l'IL. Elle est donc d'autant plus importante que l'interface Si - IL est proche de la source d'oxygène (cas d'un IL ultra-mince).

L'ensemble des observations qualitatives précédemment citées, notamment les régimes de conduction en présence, a dû être confirmé par comparaison entre théorie tunnel et expérience. Un modèle tunnel a ainsi été développé, basé sur une description de charges incidentes obtenue par simulation Poisson-Schrödinger (voir chapitre 2) et une description parabolique de la relation de dispersion dans les diélectriques. Nous avons en particulier proposé puis comparé différentes méthodes originales de calcul de la transparence tunnel, différant par leur domaine de validité et leur intégration au sein d'un simulateur numérique.

Les comparaisons quantitatives entre théorie tunnel et courant de grille expérimental ont confirmé que le courant de grille dans un empilement SiO<sub>2</sub> est de type tunnel, et ce quelque soit la température. En régime d'inversion, nous avons validé les paramètres tunnel conventionnels des électrons dans le SiO<sub>2</sub>, à savoir  $\phi_{\text{SiO}_2} = 3,1\text{eV}$  et  $m_{\text{SiO}_2} = 0,5m_0$ .

Dans les empilements IL - HfO<sub>2</sub> - TiN, les paramètres tunnel  $\phi_{\text{HfO}_2} = 1,9\text{eV}$  et  $m_{\text{HfO}_2} = 0,165m_0$  permettent de rendre compte du courant de grille en inversion pour l'ensemble des épaisseurs d'IL et de high- $\kappa$ , excepté le cas  $t_{\text{HfO}_2} = 4,5\text{nm}$  pour lequel le HfO<sub>2</sub> cristallise et est donc susceptible de présenter des propriétés différentes du HfO<sub>2</sub> amorphe ultra-mince.

Le modèle tunnel développé présente néanmoins ses limites pour rendre compte du courant de grille en régime d'accumulation. L'approximation parabolique de la bande de valence des diélectriques n'est pas à même de décrire le transport, et une

## 8. Conclusions du chapitre 3

---

relation de dispersion de type Franz s'est avérée nécessaire pour la modélisation du courant. Les paramètres tunnel  $\phi_{h,IL} = 4,78 \text{ eV}$ ,  $\phi_{h,HfO_2} = 2,83 \text{ eV}$ ,  $m_{f,IL} = 0,5m_0$  et  $m_{f,HfO_2} = 0,22m_0$  permettent ainsi de rendre compte des niveaux de courant de grille pour l'ensemble des empilements étudiés. Seul le cas de l'empilement  $t_{HfO_2} = 4,5 \text{ nm}$  s'écarte une nouvelle fois de la simulation.

Dans ce chapitre, nous avons donc approximé les relations de dispersion de l'IL et du  $HfO_2$  par une approche parabolique en inversion et de type Franz en accumulation. Dans le cas du  $HfO_2$ , nous avons mis en évidence la cohérence de ces 2 approches, amenant à une relation de dispersion unique dans l'ensemble du gap. La structure de la bande de conduction de cet oxyde reste néanmoins sujet à caution : la transition Fowler-Nordheim n'est pas observée dans  $HfO_2$ , et l'étude du transport dans sa bande de conduction apparaît comme un enjeu essentiel pour de futures études.

Le cas de l'oxyde d'interface est moins clair, et est selon nous le signe d'un comportement tunnel différent en fonction de son épaisseur et de sa méthode de réalisation.

Enfin, il nous apparaît nécessaire d'apporter quelques commentaires sur l'approche expérimentale que nous avons suivie.

Tout d'abord, l'étude telle qu'elle a été présentée reste une étude académique pointue. Pour caractériser pleinement 2 matériaux, 10 empilements ont été réalisés : il est peu envisageable d'imaginer un tel nombre de variantes pour caractériser de nouveaux empilements ou l'influence de tel ou tel procédé de dépôt.

La bonne maîtrise des techniques de réalisation permet néanmoins d'être confiant dans l'épaisseur des couches ALD déposées, et dans la faible variabilité des paramètres intrinsèques du  $HfO_2$  (permittivité et paramètres tunnel). Les paramètres IL et  $HfO_2$  proposés dans ce chapitre peuvent donc être utilisés dans une approche prospective pour étudier les fuites de grille attendues dans un empilement  $HfO_2$ .

L'étude du courant à charge constante en fonction de la température s'est également avérée longue et fastidieuse. Elle s'est néanmoins révélée nécessaire dès lors que le high- $\kappa$  présentait une épaisseur suffisante pour que la composante assistée par pièges soit supérieure au courant tunnel. Néanmoins, pour des EOT proches de 1nm (et donc une épaisseur physique de high- $\kappa$  proche de 2nm), cette méthodologie expérimentale n'apparaît pas nécessaire, l'extraction de paramètres tunnel étant possible à température ambiante.

## Bibliographie

- [1] G. D. Wilk, R. M. Wallace, and J. M. Anthony, "High-kappa Gate Dielectrics : Current Status and Materials Properties Considerations," *Journal of Applied Physics*, vol. 89, no. 10, pp. 5243–5275, 2001. 59, 97
- [2] J. Robertson, "Band Offsets of Wide-Band-Gap Oxides and Implications for Future Electronic Devices," *Journal of Vacuum Science and Technology B*, vol. 18, no. 3, pp. 1785–1791, 2000. 59
- [3] J. F. Damlencourt, O. Renault, D. Samour, A. M. Papon, C. Leroux, F. Martin, S. Marthon, M. N. Séméria, and X. Garros, "Electrical and Physico-Chemical Characterization of HfO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub> Gate Oxide Stacks Prepared by Atomic Layer Deposition," *Solid-State Electronics*, vol. 47, no. 10, pp. 1613 – 1616, 2003. 59, 95, 97, 98
- [4] International Technology Roadmap for Semiconductors, "Process Integration, Devices, and Structures." Lien : [http://www.itrs.net/Links/2009ITRS/2009Chapters\\_2009Tables/2009\\_PIDS.pdf](http://www.itrs.net/Links/2009ITRS/2009Chapters_2009Tables/2009_PIDS.pdf) 59
- [5] H. Iwai, S. Ohmi, S. Akama, C. Ohshima, A. Kikuchi, I. Kashiwagi, J. Taguchi, H. Yamamoto, J. Tonomura, Y. Kim, I. Ueda, A. Kuriyama, and Y. Yoshihara, "Advanced Gate Dielectric Materials for sub-100 nm CMOS," *IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, 2002, pp. 869–872. 59
- [6] X. Garros, "Caractérisation et Modélisation de l'Oxyde d'Hafnium comme Alternative à la Silice pour les Futures Technologies CMOS Submicroniques," Thèse de Doctorat, Université de Provence - Aix-Marseille I, 2004. 59, 96, 106, 107
- [7] B. H. Lee, L. Kang, R. Nieh, W.-J. Qi, and J. C. Lee, "Thermal Stability and Electrical Characteristics of Ultrathin Hafnium Oxide Gate Dielectric Reoxidized with Rapid Thermal Annealing," *Applied Physics Letters*, vol. 76, no. 14, pp. 1926–1928, 2000. 59
- [8] G. D. Wilk, R. M. Wallace, and J. M. Anthony, "Hafnium and Zirconium Silicates for Advanced Gate Dielectrics," *Journal of Applied Physics*, vol. 87, no. 1, pp. 484–492, 2000. 59
- [9] K. Mistry, C. Allen, C. Auth, B. Beattie, D. Bergstrom, M. Bost, M. Brazier, M. Buehler, A. Cappellani, R. Chau, C.-H. Choi, G. Ding, K. Fischer, T. Ghani, R. Grover, W. Han, D. Hanken, M. Hattendorf, J. He, J. Hicks, R. Huessner, D. Ingerly, P. Jain, R. James, L. Jong, S. Joshi, C. Kenyon, K. Kuhn, K. Lee, H. Liu, J. Maiz, B. McIntyre, P. Moon, J. Neirynck, S. Pae, C. Parker, D. Parsons, C. Prasad, L. Pipes, M. Prince, P. Ranade, T. Reynolds, J. Sandford, L. Shifren, J. Sebastian, J. Seiple, D. Simon, S. Sivakumar, P. Smith, C. Thomas, T. Troeger, P. Vandervoorn, S. Williams, and K. Zawadzki, "A 45nm Logic

## Bibliographie

---

- Technology with High-k+Metal Gate Transistors, Strained Silicon, 9 Cu Interconnect Layers, 193nm Dry Patterning, and 100pc Pb-free Packaging,” *IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, 2007, pp. 247–250. [59](#)
- [10] B. Eitan and A. Kolodny, “Two Components of Tunneling Current in Metal-Oxide-Semiconductor Structures,” *Applied Physics Letters*, vol. 43, no. 1, pp. 106–108, 1983. [61](#)
- [11] Y. Shi, T. P. Ma, S. Prasad, and S. Dhanda, “Polarity Dependent Gate Tunneling Currents in Dual-Gate CMOSFETs,” *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 45, no. 11, pp. 2355–2360, 1998. [61](#)
- [12] W.-C. Lee and C. Hu, “Modeling CMOS Tunneling Currents through Ultrathin Gate Oxide due to Conduction- and Valence-Band Electron and Hole Tunneling,” *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 48, no. 7, pp. 1366–1373, 2001. [61](#)
- [13] W. Mizubayashi, N. Yasuda, K. Okada, H. Ota, H. Hisamatsu, K. Iwamoto, K. Tominaga, K. Yamamoto, T. Horikawa, T. Nabatame, H. Satake, and A. Toriumi, “Carrier Separation Analysis for Clarifying Carrier Conduction and Degradation Mechanisms in High-k Stack Gate Dielectrics,” *Microelectronics Reliability*, vol. 45, no. 7-8, pp. 1041 – 1050, 2005. [61](#)
- [14] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë, *Mécanique quantique*. Hermann, 1997. [64](#)
- [15] G. Ghibaudo, R. Clerc, E. Vincent, S. Bruyère, and J. L. Autran, “Challenges in Microelectronics : Ultimate gate dielectrics for CMOS technologies, limitations and alternative solutions,” *Comptes-rendus de l’Académie des Sciences Paris*, vol. 1, pp. 911 – 927, 2000. [65](#)
- [16] R. H. Fowler and L. Nordheim, “Electron Emission in Intense Electric Fields,” *Proceedings of the Royal Society of London*, vol. 119, pp. 173 – 181, 1928. [65](#)
- [17] C. Chang, “Tunneling in Thin Gate Oxide MOS Structures,” Thèse de Doctorat, University of California, Berkeley, 1984. [65](#), [117](#)
- [18] D. J. DiMaria, E. Cartier, and D. A. Buchanan, “Anode Hole Injection and Trapping in Silicon Dioxide,” *Journal of Applied Physics*, vol. 80, no. 1, pp. 304–317, 1996. [65](#)
- [19] G. Pananakakis, G. Ghibaudo, R. Kies, and C. Papadas, “Temperature dependence of the Fowler–Nordheim current in metal-oxide-degenerate semiconductor structures,” *Journal of Applied Physics*, vol. 78, no. 4, pp. 2635–2641, 1995. [66](#)
- [20] P. Riess, “Analyse des mécanismes de transport et de génération du SILC,” Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 1999. [66](#)



- [21] F. Jimenez-Molinos, F. Gamiz, A. Palma, P. Cartujo, and J. A. Lopez-Villanueva, "Direct and trap-assisted elastic tunneling through ultrathin gate oxides," *Journal of Applied Physics*, vol. 91, no. 8, pp. 5116–5124, 2002. [66](#)
- [22] D. Ielmini, A. Spinelli, M. Rigamonti, and A. Lacaita, "Modeling of SILC based on electron and hole tunneling. I. Transient effects," *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 47, no. 6, pp. 1258 –1265, 2000. [67](#)
- [23] J. Frenkel, "On pre-breakdown phenomena in insulators and electronic semiconductors," *Physical Review*, vol. 54, pp. 647–648, 1938. [67](#)
- [24] J. Maserjian, "Tunneling in Thin MOS Structures," *Journal of Vacuum Science and Technology*, vol. 11, no. 6, pp. 996–1003, 1974. [68](#), [88](#)
- [25] S.-H. Lo, D. A. Buchanan, Y. Taur, and W. Wang, "Quantum-Mechanical Modeling of Electron Tunneling Current from the Inversion Layer of Ultra-Thin-Oxide nMOSFET's," *IEEE Electron Device Letters*, vol. 18, no. 5, pp. 209–211, 1997. [68](#), [88](#)
- [26] Y. Zhao and M. H. White, "Modeling of Direct Tunneling Current Through Interfacial Oxide and High-K Gate Stacks," *Solid-State Electronics*, vol. 48, no. 10-11, pp. 1801 – 1807, 2004. [68](#)
- [27] L. F. Register, E. Rosenbaum, and K. Yang, "Analytic Model for Direct Tunneling Current in Polycrystalline Silicon-Gate Metal–Oxide–Semiconductor Devices," *Applied Physics Letters*, vol. 74, no. 3, pp. 457–459, 1999. [68](#), [74](#), [75](#)
- [28] B. Govoreanu, P. Blomme, K. Henson, J. V. Houdt, and K. D. Meyer, "An Effective Model for Analysing Tunneling Gate Leakage Currents Through Ultrathin Oxides and High-k Gate Stacks from Si Inversion Layers," *Solid-State Electronics*, vol. 48, no. 4, pp. 617 – 625, 2004. [68](#), [81](#)
- [29] F. Li, S. P. Mudanai, Y.-Y. Fan, L. F. Register, and S. K. Banerjee, "Physically Based Quantum-Mechanical Compact Model of MOS Devices Substrate-Injected Tunneling Current Through Ultrathin (EOT 1 nm) SiO<sub>2</sub> and High-k Gate Stacks," *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 53, no. 5, pp. 1096–1106, 2006. [68](#), [75](#), [81](#), [96](#)
- [30] R. Clerc, G. Ghibaudo, and G. Pananakakis, "Bardeen's Approach for Tunneling Evaluation in MOS Structures," *Solid-State Electronics*, vol. 46, no. 7, pp. 1039 – 1044, 2002. [68](#)
- [31] J. Cai and C.-T. Sah, "Gate tunneling currents in ultrathin oxide metal–oxide–silicon transistors," *Journal of Applied Physics*, vol. 89, no. 4, pp. 2272–2285, 2001. [68](#)
- [32] J. Wang, Y. Ma, L. Tian, and Z. Li, "Modified Airy Function Method for Modeling of Direct Tunneling Current in Metal–Oxide–Semiconductor Structures," *Applied Physics Letters*, vol. 79, no. 12, pp. 1831–1833, 2001. [68](#)

## Bibliographie

---

- [33] E. Cassan, P. Dollfus, S. Galdin, and P. Hesto, "Semiclassical and wave mechanical modeling of charge control and direct tunneling leakage in MOS and H-MOS devices with ultra-thin oxides," *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 48, no. 4, pp. 715–721, 2001. 68
- [34] D. Munteanu, J. Autran, M. Moreau, and M. Houssa, "Electron transport through high-k dielectric barriers : A non-equilibrium Green's function (NEGF) study," *Journal of Non-Crystalline Solids*, vol. 355, no. 18-21, pp. 1180–1184, 2009. 68
- [35] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Dover, 1964. 72
- [36] K. F. Brennan and C. J. Summers, "Theory of resonant tunneling in a variably spaced multiquantum well structure : An Airy function approach," *Journal of Applied Physics*, vol. 61, no. 2, pp. 614–623, 1987. 73
- [37] S. S. Allen and S. L. Richardson, "Improved airy function formalism for study of resonant tunneling in multibarrier semiconductor heterostructures," *Journal of Applied Physics*, vol. 79, no. 2, pp. 886–894, 1996. 73
- [38] University of California, Berkeley, BSIM Research Group. Lien : <http://www-device.eecs.berkeley.edu/~bsim3/> 73
- [39] NXP Semiconductors. Lien : [http://www.nxp.com/models/mos\\_models/psp/](http://www.nxp.com/models/mos_models/psp/) 73
- [40] Silvaco, ATLAS Device Simulation framework. Lien : [http://www.silvaco.com/products/device\\_simulation/atlas.html](http://www.silvaco.com/products/device_simulation/atlas.html) 73
- [41] Synopsys Device Simulation. Lien : <http://www.synopsys.com/Tools/TCAD/DeviceSimulation/Pages/default.aspx> 73
- [42] G. Wentzel, "Eine Verallgemeinerung der Quantenbedingungen für die Zwecke der Wellenmechanik," *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, vol. 38, no. 6, pp. 518–529, 1926. 74
- [43] O. Engstrom, J. Piscator, B. Raeissi, P. K. Hurley, K. Cherkaoui, S. Half, M. C. Lemmed, and H. D. B. Gottlob, "A Generalised Methodology for Oxide Leakage Current Metric," *Proc. 9th Int. Conf. Ultimate Integration of Silicon ULIS 2008*, 2008, pp. 167–170. 75
- [44] G. Darbandy, R. Ritzenthaler, F. Lime, S. I. Garduo, M. Estrada, A. Cerdeira, and B. Iiguez, "Analytical Modeling of the Gate Tunneling Leakage for the Determination of Adequate High-K Dielectrics in 22 nm Double-Gate SOI MOSFETs," *Proc. Int. Semiconductor Device Research Symp. ISDRS '09*, 2009, pp. 1–2. 75

- 
- [45] G. Joshi, D. N. Singh, and S. Thangjam, "Effect of Temperature Variation on Gate Tunneling Currents in Nanoscale MOSFETs," *Proc. 8th IEEE Conf. Nanotechnology NANO '08*, 2008, pp. 37–41. [75](#)
  - [46] H. Wu, Y. S. Zhao, and M. H. White, "Quantum mechanical modeling of mosfet gate leakage for high-k gate dielectrics," *Solid-State Electronics*, vol. 50, no. 6, pp. 1164 – 1169, 2006. [75](#), [96](#)
  - [47] Y. Ando and T. Itoh, "Calculation of Transmission Tunneling Current Across Arbitrary Potential Barriers," *Journal of Applied Physics*, vol. 61, no. 4, pp. 1497–1502, 1987. [75](#)
  - [48] J. G. Simmons, "Electric Tunnel Effect between Dissimilar Electrodes Separated by a Thin Insulating Film," *Journal of Applied Physics*, vol. 34, no. 9, pp. 2581–2590, 1963. [77](#)
  - [49] A. Dalla Serra, A. Abramo, P. Palestri, L. Selmi, and F. Widdershoven, "Closed- and Open-Boundary Models for Gate-Current Calculation in n-MOSFETs," *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 48, no. 8, pp. 1811–1815, 2001. [81](#)
  - [50] J. Coignus, R. Clerc, C. Leroux, G. Reimbold, G. Ghibaudo, and F. Boulanger, "Analytical modeling of tunneling current through SiO<sub>2</sub>–HfO<sub>2</sub> stacks in metal oxide semiconductor structures," *Journal of Vacuum Science & Technology B : Microelectronics and Nanometer Structures*, vol. 27, no. 1, pp. 338–345, 2009. [82](#)
  - [51] H. Mathieu, *Physique des Semiconducteurs et des Composants Electroniques*. Dunod, 2001. [83](#)
  - [52] C. Leroux, P. Mur, N. Rochat, D. Rouchon, R. Truche, G. Reimbold, and G. Ghibaudo, "Characterization and modeling of nanometric SiO<sub>2</sub> dielectrics," *Microelectronic Engineering*, vol. 72, no. 1-4, pp. 121 – 124, 2004. [84](#)
  - [53] O. Simonetti, T. Maurel, and M. Jourdain, "Characterization of ultrathin metal–oxide–semiconductor structures using coupled current and capacitance–voltage models based on quantum calculation," *Journal of Applied Physics*, vol. 92, no. 8, pp. 4449–4458, 2002. [84](#), [85](#)
  - [54] P. Mur, M. N. Semeria, M. Olivier, A. M. Papon, C. Leroux, G. Reimbold, P. Gentile, N. Magnea, T. Baron, R. Clerc, and G. Ghibaudo, "Ultra-thin Oxides Grown on Silicon (100) by Rapid Thermal Oxidation for CMOS and Advanced Devices," *Applied Surface Science*, vol. 175–176, pp. 726 – 733, 2001. [86](#)
  - [55] M. L. Green, E. P. Gusev, R. Degraeve, and E. L. Garfunkel, "Ultrathin ([less-than] 4 nm) SiO<sub>2</sub> and Si–O–N Gate Dielectric Layers for Silicon Microelectronics : Understanding the Processing, Structure, and Physical and Electrical Limits," *Journal of Applied Physics*, vol. 90, no. 5, pp. 2057–2121, 2001. [86](#)

- [56] C. Auth, A. Cappellani, J.-S. Chun, A. Dalis, A. Davis, T. Ghani, G. Glass, T. Glassman, M. Harper, M. Hattendorf, P. Hentges, S. Jaloviar, S. Joshi, J. Klaus, K. Kuhn, D. Lavric, M. Lu, H. Mariappan, K. Mistry, B. Norris, N. Rahhal-orabi, P. Ranade, J. Sandford, L. Shifren, V. Souw, K. Tone, F. Tambwe, A. Thompson, D. Towner, T. Troeger, P. Vandervoorn, C. Wallace, J. Wiedemer, and C. Wiegand, “45nm High-k + metal gate strain-enhanced transistors,” *Proc. Symp. VLSI Technology*, 2008, pp. 128–129. [87](#)
- [57] S. Natarajan, M. Armstrong, M. Bost, R. Brain, M. Brazier, C.-H. Chang, V. Chikarmane, M. Childs, H. Deshpande, K. Dev, G. Ding, T. Ghani, O. Golonzka, W. Han, J. He, R. Heussner, R. James, I. Jin, C. Kenyon, S. Klopčič, S.-H. Lee, M. Liu, S. Lodha, B. McFadden, A. Murthy, L. Neiberg, J. Neirynck, P. Packan, S. Pae, C. Parker, C. Peltó, L. Pipes, J. Sebastian, J. Seiple, B. Sell, S. Sivakumar, B. Song, K. Tone, T. Troeger, C. Weber, M. Yang, A. Yeoh, and K. Zhang, “A 32nm logic technology featuring 2nd-generation high-k + metal-gate transistors, enhanced channel strain and 0.171 $\mu$ m<sup>2</sup> sram cell size in a 291mb array,” *International Electron Devices Meeting (IEDM)*, 2008, pp. 1–3. [87](#)
- [58] R. Clerc, A. S. Spinelli, G. Ghibaudo, C. Leroux, and G. Pananakakis, “Electrical Characterization and Quantum Modeling of MOS Capacitors with Ultra-Thin Oxides (1.4-3 nm),” *Microelectronics Reliability*, vol. 41, no. 7, pp. 1027 – 1030, 2001. [88](#)
- [59] K. Romanjek, “Caractérisation et Modélisation des Transistors CMOS des Technologies 50nm et en-deçà,” Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2004. [88](#)
- [60] X. Garros, J. Mitard, C. Leroux, G. Reimbold, and F. Boulanger, “In Depth Analysis of VT Instabilities in HfO<sub>2</sub> Technologies by Charge Pumping Measurements and Electrical Modeling,” *Proc. proceedings Reliability physics symposium 45th annual. ieee international*, 2007, pp. 61–66. [91](#), [94](#)
- [61] S. Monaghan, P. K. Hurley, K. Cherkaoui, M. A. Negara, and A. S. Tyn-dall, “Determination of physical parameters for HfO<sub>2</sub>/SiO<sub>x</sub>/TiN MOSFET gate stacks by electrical characterization and reverse modeling,” *Proc. 9th Int. Conf. Ultimate Integration of Silicon ULIS 2008*, 2008, pp. 107–110. [95](#)
- [62] C. Gaumer, “Caractérisation Physico-Chimique Front-End : Canal - Diélectrique - Métal,” Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2010. [96](#)
- [63] P. Besson, V. Loup, T. Salvétat, N. Rochat, S. Lhostis, S. Favier, K. Daberrand, and V. Cosnier, “Critical Thickness Threshold in HfO<sub>2</sub> Layers,” *Solid State Phenomena*, vol. 134, pp. 67–70, 2008. [96](#)

- 
- [64] J. Buckley, B. De Salvo, G. Molas, M. Gely, and S. Deleonibus, "Experimental and theoretical study of layered tunnel barriers for nonvolatile memories," *Proc. 35th European Solid-State Device Research Conf. ESSDERC*, 2005, pp. 509–512. [96](#)
  - [65] S. Kar, S. Rawat, S. Rakheja, and D. Reddy, "Characterization of accumulation layer capacitance for extracting data on high-k gate dielectrics," *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 52, no. 6, pp. 1187–1193, 2005. [96](#), [107](#)
  - [66] A. Campera, G. Iannaccone, and F. Crupi, "Modeling of Tunnelling Currents in Hf-Based Gate Stacks as a Function of Temperature and Extraction of Material Parameters," *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 54, no. 1, pp. 83–89, 2007. [96](#), [107](#)
  - [67] P. Palestri, N. Barin, D. Brunel, C. Busseret, A. Campera, P. A. Childs, F. Driussi, C. Fiegna, G. Fiori, R. Gusmeroli, G. Iannaccone, M. Karner, H. Kosina, A. L. Lacaita, E. Langer, B. Majkusiak, C. M. Compagnoni, A. Poncet, E. Sangiorgi, L. Selmi, A. S. Spinelli, and J. Walczak, "Comparison of Modeling Approaches for the Capacitance-Voltage and Current-Voltage Characteristics of Advanced Gate Stacks," *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 54, no. 1, pp. 106–114, 2007. [96](#)
  - [68] B. Govoreanu, P. Blomme, M. Rosmeulen, J. V. Houdt, and K. D. Meyer, "A model for tunneling current in multi-layer tunnel dielectrics," *Solid-State Electronics*, vol. 47, no. 6, pp. 1045 – 1053, 2003. [96](#)
  - [69] Y. T. Hou, M. F. Li, H. Y. Yu, and D.-L. Kwong, "Modeling of tunneling currents through HfO<sub>2</sub> and (HfO<sub>2</sub>)<sub>x</sub>(Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)<sub>1-x</sub> gate stacks," *IEEE Electron Device Letters*, vol. 24, no. 2, pp. 96–98, 2003. [96](#), [107](#)
  - [70] D. Liu and J. Robertson, "Passivation of oxygen vacancy states and suppression of Fermi pinning in HfO<sub>2</sub> by La addition," *Applied Physics Letters*, vol. 94, no. 4, p. 042904, 2009. [98](#)
  - [71] S. M. Sze and K. K. Ng, *Physics of Semiconductor Devices*. Wiley-Interscience, 2006. [105](#)
  - [72] M. Charbonnier, C. Leroux, V. Cosnier, P. Besson, E. Martinez, N. Benedetto, C. Licitra, N. Rochat, C. Gaumer, K. Kaja, G. Ghibaudo, F. Martin, and G. Reimbold, "Measurement of Dipoles/Roll-Off /Work Functions by Coupling CV and IPE and Study of Their Dependence on Fabrication Process," *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 57, no. 8, pp. 1809–1819, 2010. [105](#)
  - [73] F. Sacconi, J. Jancu, M. Povolotskyi, and A. Di Carlo, "Full-Band Tunneling in High-k Oxide MOS Structures," *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 54, no. 12, pp. 3168 –3176, 2007. [106](#), [107](#), [115](#), [116](#)

## Bibliographie

---

- [74] M. Stadele, B. R. Tuttle, and K. Hess, “Tunneling through ultrathin SiO<sub>2</sub> gate oxides from microscopic models,” *Journal of Applied Physics*, vol. 89, no. 1, pp. 348–363, 2001. [106](#)
- [75] W. Franz, *Handbuch der Physik*, Springer, Ed. S. Flugge, 1956. [109](#)
- [76] Z. A. Weinberg, “On tunneling in metal-oxide-silicon structures,” *Journal of Applied Physics*, vol. 53, no. 7, pp. 5052–5056, 1982. [109](#)
- [77] J. Buckley, “Etude de mémoires Flash intégrant des diélectriques high-k en tant qu’oxyde tunnel ou couche de stockage,” Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2006. [118](#)



# Etude des additifs Magnésium et Lanthane

---

Au fil des nœuds technologiques, il est nécessaire d'accroître le contrôle électrostatique de la grille sur le canal de conduction pour lutter contre les effets de canal court [1]. L'optimisation de l'empilement de grille consiste donc à diminuer son CET<sup>1</sup>, donné par  $CET = \text{Polydép\l{e}tion} + EOT + \text{Darkspace}$ .

Au cours des chapitres précédents, nous avons essentiellement insisté sur la réduction d'EOT, rendue possible par l'intégration de diélectriques high- $\kappa$ . Néanmoins, la diminution de CET passe également par le remplacement des grilles Polysilicium conventionnelles (nœuds 65nm et supérieurs) par des grilles métalliques. Leur introduction permet ainsi de s'affranchir du phénomène de Polydép\l{e}tion, permettant un gain de CET d'environ 4Å [2].

Une grille métallique dite *midgap* possède un niveau de Fermi en regard du milieu du gap du Silicium. Le métal TiN présente notamment ce comportement quand il est déposé avec un procédé et un enrichissement en azote adaptés [3]. Au sein d'une filière CMOS, l'utilisation d'une telle grille pour les transistors nMOS et pMOS conduit à des tensions de seuil équivalentes dans les 2 structures (de l'ordre de 0,6 V en valeur absolue), compatibles avec les spécifications ITRS du nœud 32nm *Low-Power*.

Néanmoins, les valeurs de tension de seuil attendues pour le nœud 32nm *High-Performance* se situent autour de 0,3 V. Respecter ces spécifications impose alors l'utilisation de deux grilles métalliques différentes :

- un métal présentant un travail de sortie  $n^+$  pour les nMOS,
- un métal présentant un travail de sortie  $p^+$  pour les pMOS.

Pour des raisons de stabilité thermique du travail de sortie des métaux de grille, cette approche est plus facilement envisagée dans un procédé froid, de type gate last [4]. Une méthode alternative, plus adaptée à une approche classique gate first, consiste à garder un même métal de grille et à introduire des matériaux additifs dans les empilements qui permettent de décaler le niveau de Fermi du TiN vers la valeur désirée. Ces additifs, différents dans les cas nMOS et pMOS, modifient la tension de bandes plates et donc la tension de seuil. Ils interagissent avec les différents matériaux composant l'empilement de grille (diélectriques et métal) et sont donc susceptibles d'induire des modifications de leurs propriétés intrinsèques.

Ce chapitre vise à utiliser les méthodologies développées et l'expertise acquise

---

1. On rappelle que le CET est l'épaisseur équivalente électrique de l'empilement.



dans le chapitre 3 sur des technologies en cours de développement pour l'optimisation des transistors nMOS. Nous identifierons notamment les domaines de validité et les limites de notre approche, appliquée à l'étude d'empilements avec additifs.

La première partie de ce chapitre traite de l'introduction de MgO dans un empilement nMOS HfO<sub>2</sub>. Une diminution de la tension de seuil, et donc de la tension de bandes plates, est attendue. De même, la seconde partie étudie les effets de l'incorporation de Lanthane.

# 1 Etude de l'additif MgO

## 1.1 Introduction

L'introduction d'oxyde de Magnésium MgO dans un empilement MOS permet un décalage du niveau de Fermi du TiN de grille, initialement midgap, vers un comportement  $n^+$ . Cet additif est donc adapté à l'optimisation de la tension de seuil d'un transistor nMOS pour des applications *High-Performance*.

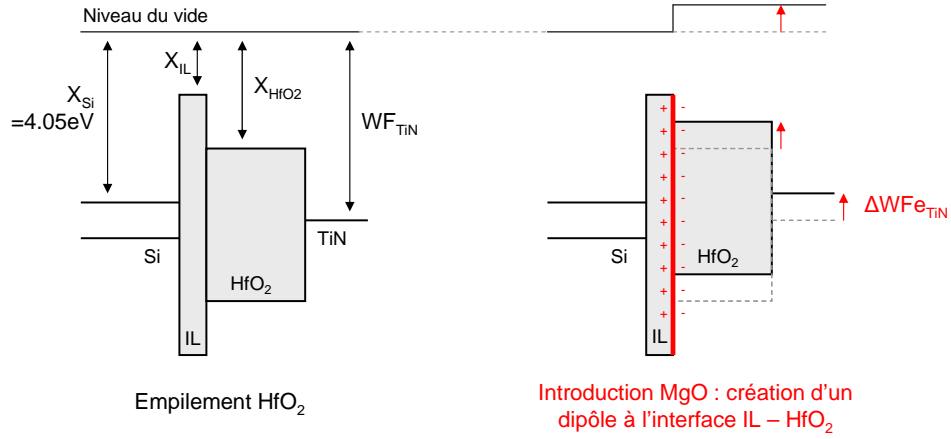


FIGURE 4.1 – Structures de bande schématiques d'un empilement conventionnel IL - HfO<sub>2</sub> - TiN et d'une même structure avec l'additif MgO.

La Figure 4.1 montre la structure de bande schématique d'un empilement conventionnel IL - HfO<sub>2</sub> - TiN (figure de gauche). L'affinité électronique du Silicium  $\chi_{Si} = 4,05 \text{ eV}$  [5] et les hauteurs de barrière extraites dans le chapitre précédent nous permettent de retenir les affinités électroniques suivantes pour l'oxyde d'interface et le HfO<sub>2</sub> :  $\chi_{IL} = 0,95 \text{ eV}$  et  $\chi_{HfO_2} = 2,15 \text{ eV}$ . Ces valeurs sont en bon accord avec la littérature [3, 6, 7]. Le travail de sortie du TiN ( $WF_{TiN}$ ) est de 4,61 eV et définit l'écart entre le niveau du vide et le niveau de Fermi dans le matériau.

La figure de droite représente l'effet que nous attendons sur l'empilement après incorporation de MgO, à savoir l'apparition d'un dipôle à l'interface IL - HfO<sub>2</sub><sup>2</sup>. L'effet du dipôle peut s'apparenter à un décalage du niveau du vide, c'est-à-dire de la référence d'énergie des matériaux de l'empilement, modifie le travail de sortie apparent du TiN d'une valeur notée  $\Delta WF_{FeTiN}$  et conduit donc à une diminution de la tension de seuil du transistor.

Le dipôle a également un effet sur les hauteurs de barrière du HfO<sub>2</sub> par rapport au Silicium : il augmente la barrière vue par les électrons de la bande de conduction du Silicium, diminue celle des trous et une modification de la conduction est donc

2. A noter que la structure de bande décrite reste schématique et ne représente que le comportement idéal (et souhaité) de l'empilement.

attendue.

Dans ce paragraphe, nous nous proposons donc de mesurer l'impact de l'additif MgO sur le travail de sortie effectif de l'empilement (extraction de  $V_{FB}$ ) et de corrélérer ces observations avec l'évolution du courant de grille.

## 1.2 Description des structures étudiées

Deux transistors nMOS sur substrat Silicium bulk orienté  $\langle 100 \rangle$  ont été étudiés : un empilement référence  $HfO_2$  (dénommé **A**) et un empilement  $HfO_2$ -MgO- $HfO_2$  (dénommé **B**). Les caractéristiques des structures testées sont présentées dans le Tableau 4.1.

Une différence importante par rapport aux échantillons présentés dans le chapitre précédent est l'utilisation d'un précurseur ALD à base d'ozone ( $O_3$ ) lors du dépôt  $HfO_2$ . Les dépôts ALD de  $HfO_2$  et MgO sont ensuite suivis de recuits conventionnels à  $650^\circ C$ .

Enfin, contrairement au chapitre précédent, un procédé chaud de type gate first a été utilisé : le recuit haute-température (plus de  $1000^\circ C$ ), réalisé après l'encapsulation de la grille, est susceptible d'influer sur les propriétés des matériaux IL et  $HfO_2$  et donc sur la conduction électrique.

	Dispositif <b>A</b>	Dispositif <b>B</b>
Dopage substrat p	$2.10^{23} m^{-3}$	$2.10^{23} m^{-3}$
IL	Chimique	Chimique
Empilement	2,25 nm $HfO_2$	0,25 nm $HfO_2$ + 0,3 nm MgO + 2 nm $HfO_2$
Grille	TiN PVD 5nm	TiN PVD 5nm
Procédé	Gate first	Gate first
EOT	1,46 nm	1,46 nm
$V_{FB}$ (à 300K)	-0,594 V	-0,964 V

TABLEAU 4.1 – Caractéristiques des empilements de grille nMOS caractérisés.

Le Tableau 4.1 donne également les valeurs d'EOT et de tension de bandes plates  $V_{FB}$  de chaque empilement, extraites à partir des caractéristiques électriques  $C(V_g)$  à température ambiante (comparaison expérience - théorie Poisson-Schrödinger).

## 1.3 Analyse des paramètres $V_{FB}$ et EOT

L'introduction de la couche MgO induit un décalage de tension de bandes plates  $\Delta W_{FeTiN} = 370 mV$ . La valeur obtenue est cohérente avec celles reportées dans [8], pour un recuit MgO proche de  $650^\circ C$ . Cette valeur reste néanmoins fortement dépendante de la température de recuit : par exemple, Morooka et al. [9] n'observent pas de décalage de tension de bandes plates pour des valeurs de recuit post-dépôt

## 1. Etude de l'additif MgO

---

supérieures à 1000°C. A de telles températures, le recuit a pour effet de vaporiser le MgO, empêchant donc la modification du travail de sortie effectif de la grille. Néanmoins, leur étude repose sur un empilement dans lequel le MgO est déposé entre le high- $\kappa$  et le métal : il n'est donc pas encapsulé pendant le recuit post-dépôt, contrairement à l'empilement **B** considéré ici (encapsulation du MgO dans le HfO<sub>2</sub>).

Nous observons un même EOT dans les 2 empilements testés, égal à 1,46 nm. A première vue, ce résultat est surprenant : l'ajout d'un matériau dans l'empilement **B** augmente son épaisseur physique et nous attendons donc une augmentation d'EOT. Différentes hypothèses sont susceptibles d'expliquer cette observation :

- John Robertson estime la permittivité du MgO environ égale à  $10\epsilon_0$  [10]. Bien que théorique et pouvant s'écarter de la réalité expérimentale, cette valeur permet de calculer une augmentation théorique d'EOT de 1,2Å entre les empilements **A** et **B**. Néanmoins, un tel écart est faible et la variabilité d'EOT entre les différents empilements, inhérente au process, peut expliquer l'égalité des EOT extraits. De même, le dipôle formé est susceptible de présenter une forte permittivité, conduisant à une recroissance d'EOT très faible et difficilement mesurable.
- Dans un empilement HfO<sub>2</sub>, les recuits favorisent la migration d'atomes d'oxygène du high- $\kappa$  vers le Silicium, conduisant à une recroissance d'oxyde d'interface. Dans un empilement MgO, la présence d'atomes de Magnésium dans le HfO<sub>2</sub> est susceptible d'atténuer ce phénomène et limiterait donc la recroissance d'oxyde.
- Enfin, la diffusion d'atomes de Magnésium au cours des recuits peuvent entraîner un changement de phase du HfO<sub>2</sub>, entraînant une augmentation de la permittivité  $\epsilon_{\text{HfO}_2}$  (on parle alors d'effet “ $\kappa$ -boost”). G. Tilloca [11] souligne cet effet dans le cas de l'incorporation de MgO, conduisant à une cristallisation du HfO<sub>2</sub> en phase cubique. De même, les travaux de Chalker et al. [12] quantifient l'augmentation de permittivité du HfO<sub>2</sub>, passant de 25 à  $32\epsilon_0$  après un changement de phase amorphe  $\rightarrow$  cubique (cas d'une incorporation de cérium). Cette augmentation serait alors conforme avec un EOT constant entre les empilements **A** et **B** malgré la différence d'épaisseur physique.

A ce stade de l'étude, les éléments en notre possession ne permettent pas de privilégier telle ou telle hypothèse. L'apport des méthodes d'extraction de paramètres (proposées dans le chapitre précédent) et l'analyse de la conduction dans les empilements **A** et **B** sont susceptibles d'apporter des réponses à ces interrogations et feront l'objet du paragraphe 1.5.

### 1.4 Analyse physique de l'empilement Magnésium

Le décalage  $\Delta W_{\text{FeTiN}} = 370 \text{ mV}$  que nous avons observé est donc conforme aux attentes. Son origine peut résider en la formation d'un dipôle à l'interface IL - high- $\kappa$  (comportement idéal attendu), mais également en la présence de charges positives Mg<sup>2+</sup> dans le HfO<sub>2</sub>.

La localisation des éléments Magnésium dans un empilement  $\text{HfO}_2$  a été étudiée par Pierreux et al. [8] grâce à des analyses physico-chimiques AR-XPS<sup>3</sup> réalisées sur des empilements Si - IL - 2nm  $\text{HfO}_2$  - 1nm MgO. Ces analyses montrent qu'au cours du recuit post-dépôt (dans leur cas à une température de 800°C), les atomes de Magnésium migrent de leur position initiale (interface métal - high- $\kappa$ ) jusqu'à l'interface IL - Silicium (ces résultats sont reproduits en Figure 4.2).

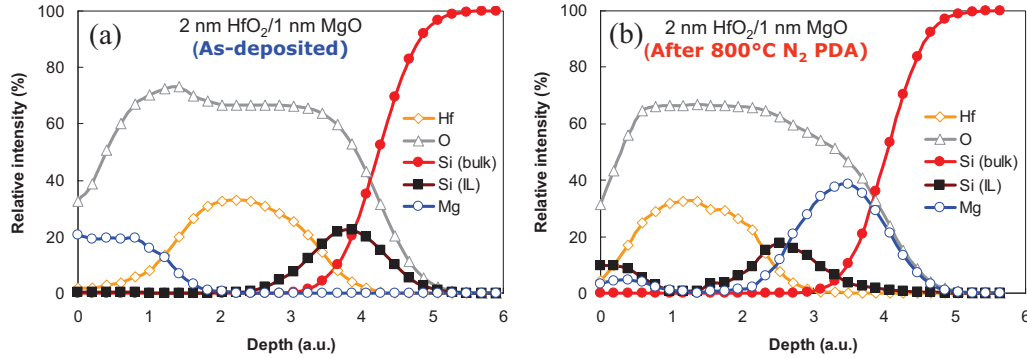


FIGURE 4.2 – Mesures AR-XPS réalisées sur un empilement Si - IL - 2nm  $\text{HfO}_2$  - 1nm MgO avant recuit (figure de gauche) et après recuit à 800°C (figure de droite). Les graphiques représentent la composition chimique de l'empilement en fonction de la position (données issues de [8]).

Néanmoins, par rapport à l'empilement étudié dans les travaux de Pierreux et al., la structure **B** présente 3 différences essentielles : le recuit post-dépôt est réalisé à plus basse température (650°C), l'épaisseur MgO initiale est plus faible (3Å) et la couche est déposée à 2,5Å de l'interface IL - high- $\kappa$ . Néanmoins, bien que le MgO soit déposé proche de l'emplacement souhaité pour le dipôle, le recuit post-dépôt est susceptible de favoriser la diffusion des atomes de Magnésium à travers l'oxyde d'interface, comme souligné dans les analyses AR-XPS précédentes.

Des données électriques complémentaires peuvent être analysées pour mesurer la qualité de l'interface IL - Silicium, et ainsi souligner l'éventuelle présence d'éléments Magnésium au voisinage de cette interface. Les résultats obtenus au CEA-LETI par Mikaël Cassé montrent ainsi de manière détournée l'influence de l'épaisseur initiale de MgO sur la position finale des atomes de Magnésium : la Figure 4.3 compare notamment différentes structures avec différentes épaisseurs de MgO et mesure l'influence de ce paramètre sur la mobilité des porteurs dans le canal et la densité de pièges d'interface. Ces résultats électriques permettent de mesurer la qualité de l'interface IL - Silicium : elle apparaît nettement dégradée quand la couche MgO est épaisse (faible mobilité et forte densité de pièges d'interface) et est améliorée pour une couche MgO de 3Å (cas de l'empilement **B**). Ce dernier

3. AR-XPS (*Angle Resolved X-Ray Photoelectron Spectroscopy*) : méthode physico-chimique permettant la mesure des concentrations de différents éléments chimiques au sein d'un empilement.

## 1. Etude de l'additif MgO

résultat est en accord avec [13] et semble indiquer l'absence d'éléments Magnésium à l'interface IL - Silicium dans l'empilement **B**.

Nous concluons donc que l'essentiel des atomes de Magnésium se situent à l'interface high- $\kappa$  - IL.

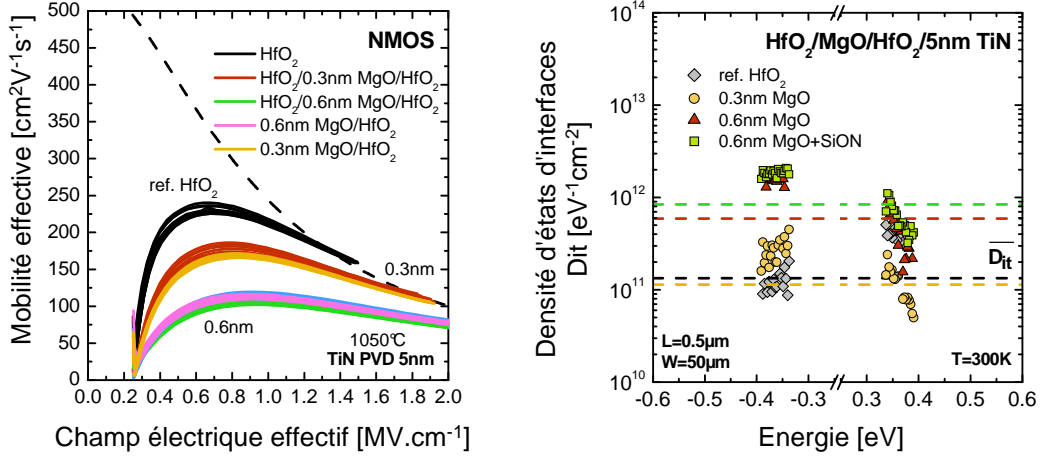


FIGURE 4.3 – Mobilité des électrons et densités de pièges d'interface extraites dans des empilements présentant différentes épaisseurs de MgO [14].

## 1.5 Analyse de la conduction électrique

### 1.5.1 Etude qualitative

Les conclusions du chapitre 3 laissent présager que le mécanisme de conduction privilégié dans les empilements **A** et **B** à température ambiante est de type tunnel, en raison des fines épaisseurs de high- $\kappa$  en jeu. L'additif MgO est néanmoins susceptible de créer des pièges assistant le courant de grille et l'étude de l'activation thermique du courant reste nécessaire.

La Figure 4.4 montre tout d'abord les caractéristiques  $I_g(V_g)$  des empilements **A** et **B** (traits pleins rouges) comparées aux caractéristiques de dispositifs appartenant à des puces voisines (traits pointillés rouges). Dans les 2 cas, nous constatons une variabilité non négligeable du courant de grille, caractéristique d'un procédé dispersé. Cette variabilité apparaît identique et reproductible sur l'ensemble des plaques et nous avons donc retenu 2 empilements de même localisation sur chacune des plaques. Ce choix, ainsi que l'étude conjointe des caractéristiques  $C(V_g)$  et  $I_g(V_g)$  d'un même empilement, permet une comparaison pertinente du comportement électrique des empilements **A** et **B**.

De plus, la séparation de porteurs (Figure 4.4, traits pleins) montre un comportement similaire des empilements **A** et **B** :

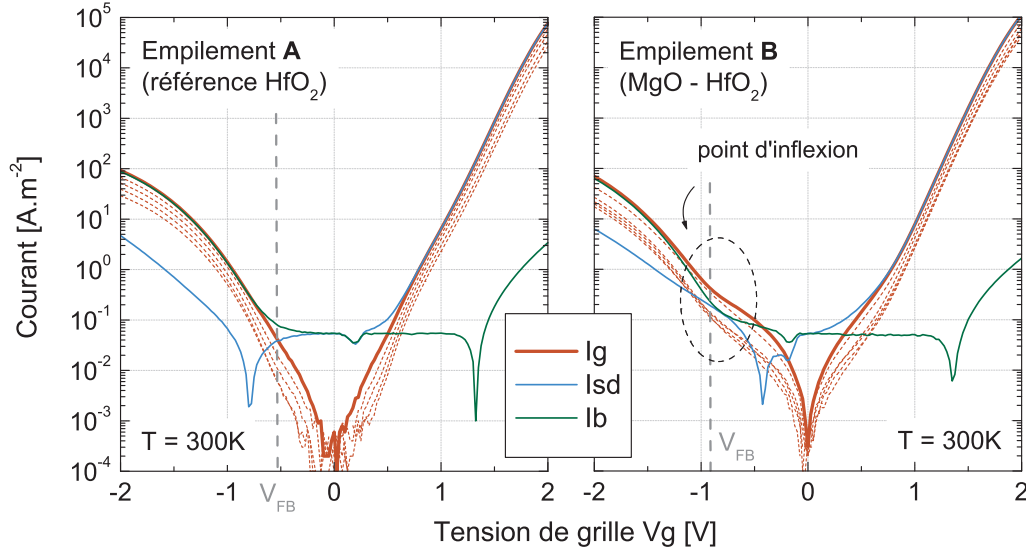


FIGURE 4.4 – Caractéristiques  $I_g(V_g)$  et mesures de séparation de porteurs des empilements **A** et **B** (traits pleins). Les traits pointillés rouges sont les caractéristiques d'empilements proches voisins (mêmes plaques) et montrent la variabilité du process.

- Pour la référence  $\text{HfO}_2$ , nous retrouvons les conclusions du chapitre 3 : un courant de grille assuré par les électrons 2D de la bande de conduction du Silicium en inversion ( $I_g = I_{sd}$ ), et l'impossibilité d'établir l'origine du courant en accumulation ( $I_g = I_b$ ).
- Dans l'empilement  $\text{MgO}$ , nous retrouvons la même tendance. La seule différence réside dans la mesure pour des tensions comprises entre -1 et 0 V (régime de désertion) : le courant source-drain  $I_{sd}$  y est plus important que dans l'empilement référence. De plus, la présence d'un point d'inflexion à  $V_g \approx V_{FB}$  laisse présager 2 composantes du courant distinctes en accumulation ( $V_g < V_{FB}$ ) et en désertion ( $V_{FB} < V_g < 0$  V).

Les caractéristiques  $I_g(V_g)$  des empilements **A** et **B** ont ensuite été mesurées à basse température (80K) et température ambiante (300K). Représentées en Figure 4.5, elle montrent l'absence d'activation thermique du courant de grille, en régime d'inversion comme en régime d'accumulation. La présence de  $\text{MgO}$  et la diffusion des atomes de Magnésium pendant le recuit n'induisent donc pas de pièges assistant le courant. Dans la suite de ce paragraphe, nous considérerons que le transport à 300K est de type tunnel, et les simulations de courant seront donc faites à cette température.

Enfin, nous constatons des niveaux de courant de grille équivalents dans l'empilement référence  $\text{HfO}_2$  et l'empilement  $\text{MgO}$  à  $V_g = \text{cte}$ . Le bénéfice de l'additif  $\text{MgO}$ , permettant une diminution de la tension de seuil, ne dégrade donc pas les

## 1. Etude de l'additif MgO

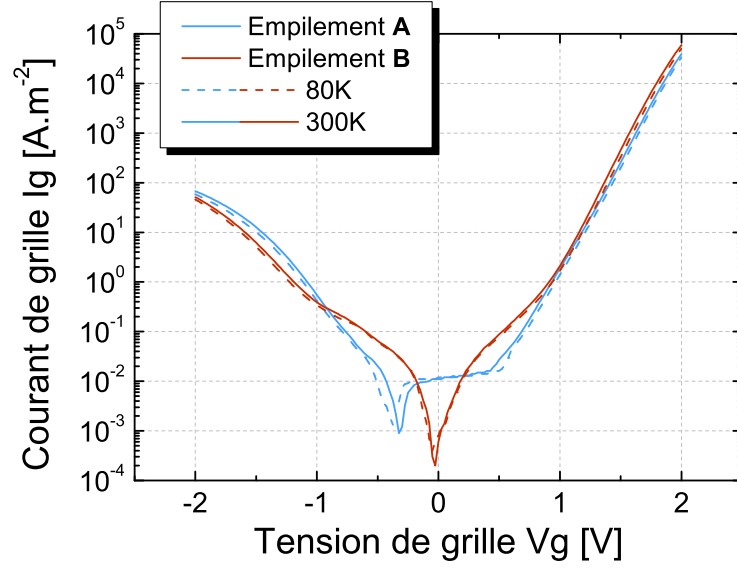


FIGURE 4.5 – Caractéristiques  $I_g(V_g)$  expérimentales des empilements **A** (référence  $\text{HfO}_2$ ) et **B** ( $\text{MgO}$ ), obtenues à 80 et 300K.

propriétés de conduction de l'empilement à  $V_g$  donné.

L'analyse des courants de grille des empilements **A** et **B** tracés en fonction de la charge dans le Silicium (Figure 4.6) va dans le sens du comportement attendu pour un effet dipôle tel qu'il est représenté en Figure 4.1 :

1. En régime d'inversion, le courant 2D d'électrons est plus faible (à charge constante) dans l'empilement  $\text{MgO}$ , en cohérence avec une hauteur de barrière  $\phi_{e,\text{HfO}_2}$  plus importante.
2. En régime d'accumulation, un phénomène inverse est observé, à savoir un courant plus important dans l'empilement  $\text{MgO}$ . Cette observation confirme à la fois que le courant de grille est assuré par les trous 2D de la bande de valence du Silicium et la présence d'un effet dipôle (baisse de la hauteur de barrière vue par les trous).

Pour conclure, l'analyse du courant de grille des empilements **A** et **B** permet de constater un effet dipôle consécutif à l'introduction de  $\text{MgO}$  dans un empilement high- $\kappa$ . Cet effet permet une baisse de la conduction en régime d'inversion (à charge constante) et une augmentation en accumulation. Ces 2 observations semblent indiquer une modification des hauteurs de barrière du  $\text{HfO}_2$ , modification que nous nous proposons désormais de vérifier et quantifier en comparant les caractéristiques  $I_g(V_g)$  expérimentales des empilements **A** et **B** avec la simulation tunnel.



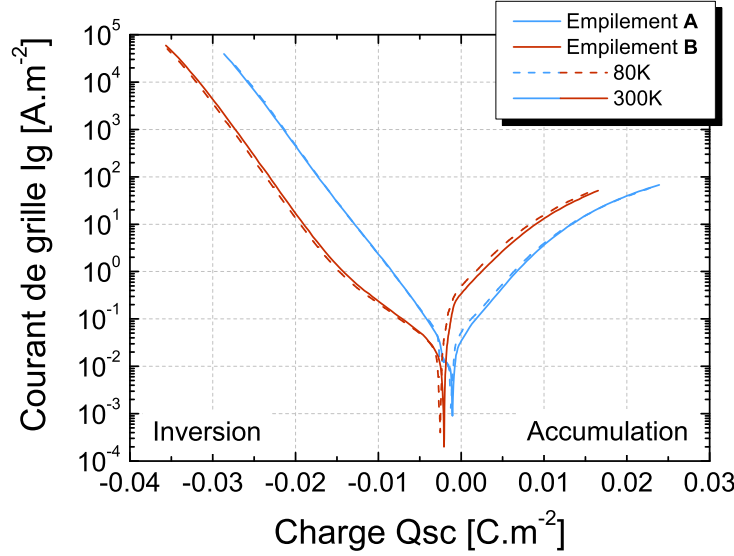


FIGURE 4.6 – Caractéristiques  $I_g(Q_{sc})$  expérimentales des empilements **A** (référence HfO<sub>2</sub>) et **B** (MgO), obtenues à 80 et 300K.

### 1.5.2 Simulation du courant de grille de l'empilement A

L'empilement référence HfO<sub>2</sub> caractérisé dans ce chapitre présente des différences par rapport aux empilements étudiés dans le chapitre 3 : les différents précurseurs ALD, la présence d'un recuit d'activation des dopants en fin de process et l'utilisation d'une grille TiN PVD 5nm à la place d'une grille TiN CVD 10nm sont autant de raisons susceptibles de modifier les propriétés des diélectriques par rapport aux grandeurs extraites dans le chapitre précédent.

Cependant, à partir des 2 seules caractéristiques électriques  $I_g(V_g)$  et  $C(V_g)$  d'un unique empilement, l'extraction de ces paramètres est critique : en effet, plus d'une dizaine sont à définir pour rendre compte du courant (épaisseurs physiques, permittivités, masses tunnel, hauteurs de barrière...). Dans un premier temps, nous choisissons donc de garder les paramètres IL et HfO<sub>2</sub> définis dans le chapitre 3 malgré les possibles différences dues aux conditions de process (première colonne du Tableau 4.2). Comme dans le chapitre 3, l'EOT, couplé à l'épaisseur ALD  $t_{\text{HfO}_2} = 2,25$  nm et aux valeurs de permittivité, permet de calculer l'épaisseur d'oxyde d'interface  $t_{\text{IL}}$ . Cette approche garantit la cohérence entre les mesures capacitives et de courant.

La Figure 4.7 montre le courant de grille expérimental à 300K comparé au courant tunnel théorique simulé avec les paramètres précédemment cités (traits pointillés rouges). Malgré les différences de process entre cette référence HfO<sub>2</sub> et les dispositifs caractérisés dans le chapitre 3, un accord correct est obtenu entre expérience et théorie et les paramètres utilisés reproduisent le niveau de courant de grille.

Néanmoins, un meilleur accord avec l'expérience est obtenu à l'aide des para-

## 1. Etude de l'additif MgO

	Paramètres du chapitre 3	Nouveaux paramètres
$\varepsilon_{\text{IL, chimique}}$	$5 \varepsilon_0$	$5 \varepsilon_0$
$\varepsilon_{\text{HfO}_2}$	$17 \varepsilon_0$	$20 \varepsilon_0$
$t_{\text{HfO}_2}$	2,25 nm	2,25 nm
$t_{\text{IL}}$	1,21 nm	$1,31 \text{ nm}$
$m_{\text{e, IL}}$ (parabolique)	$0,5 m_0$	$0,4 m_0$
$m_{\text{f, IL}}$ (Franz)	$0,5 m_0$	$0,4 m_0$
$m_{\text{e, HfO}_2}$ (parabolique)	$0,165 m_0$	$0,2 m_0$
$m_{\text{f, HfO}_2}$ (Franz)	$0,22 m_0$	$0,2 m_0$
$\phi_{\text{e, IL}}$ (électrons)	3,1 eV	3,1 eV
$\phi_{\text{h, IL}}$ (trous)	4,78 eV	4,78 eV
$\phi_{\text{e, HfO}_2}$ (électrons)	1,9 eV	$1,8 \text{ eV}$
$\phi_{\text{h, HfO}_2}$ (trous)	2,83 eV	$2,93 \text{ eV}$

TABLEAU 4.2 – Paramètres utilisés pour la simulation tunnel de l'empilement **A**. Dans les 2 stratégies de simulation adoptées, une approche parabolique est utilisé pour le courant en inversion, et une approximation de Franz pour le courant en accumulation. Les valeurs notées en rouge correspondent aux paramètres modifiés par rapport au chapitre 3.

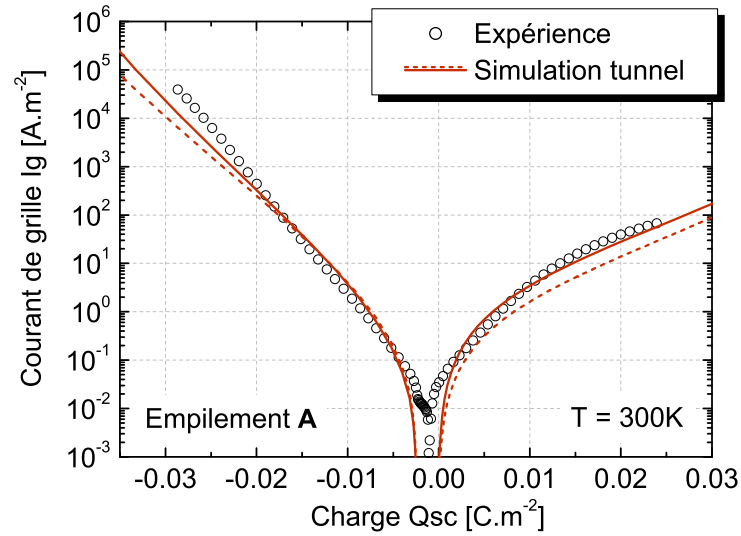


FIGURE 4.7 – Caractéristiques  $I_g(Q_{sc})$  expérimentale et simulées de l'empilement **A** (référence  $\text{HfO}_2$ ) à  $T = 300\text{K}$ . Les traits pointillés rouge reprennent les paramètres définis dans le chapitre 3, et le trait plein rouge utilise un nouvel ensemble de paramètres, défini pour optimiser l'accord théorie - expérience dans ce cas précis (voir Tableau 4.2).

mètres listés dans la deuxième colonne du Tableau 4.2. Le nombre de variables d'ajustement étant conséquent, il est important de noter qu'un ensemble de paramètres différent aurait permis d'obtenir un accord équivalent. Ces nouveaux paramètres respectent la cohérence entre EOT expérimental, valeurs de permittivité et épaisseurs physiques, et s'écartent volontairement peu des valeurs conventionnelles de la littérature ou définies dans le chapitre précédent.

Un point important à souligner est la valeur de permittivité  $\varepsilon_{\text{IL}} = 5\varepsilon_0$  choisie. L'EOT de l'empilement **A** (1,46 nm) est à comparer aux EOT des empilements Silicium - IL chimique -  $\text{HfO}_2$  - TiN étudiés dans le chapitre précédent : 1,16 nm pour l'empilement *viii* ( $t_{\text{HfO}_2} = 2$  nm) et 1,41 nm pour l'empilement *ix* ( $t_{\text{HfO}_2} = 3$  nm). L'empilement **A**, d'EOT plus importante, semble donc présenter un oxyde d'interface plus épais, en cohérence avec l'utilisation d'un procédé gate first qui favorise la recroissance d'IL<sup>4</sup>. Ne pas considérer une sous-stoechiométrie de l'IL en raison de son épaisseur plus importante (et donc définir  $\varepsilon_{\text{IL}} = \varepsilon_{\text{SiO}_2} = 3,9\varepsilon_0$ ) aurait conduit à déduire  $t_{\text{IL}} = 1,02$  nm à partir de la valeur expérimentale d'EOT. Dans ce cas, il nous a été impossible de rendre compte du courant avec des paramètres tunnel réalistes, la simulation surestimant largement l'expérience (environ 1,5 décades). Nous avons choisi de garder la valeur de permittivité établie dans le chapitre précédent, conduisant à déduire une épaisseur  $t_{\text{IL}} = 1,31$  nm et permettant d'obtenir un accord expérience - théorie satisfaisant.

Notre approche expérimentale est donc ici suffisante pour rendre compte du courant, mais peinerait à identifier clairement les réels paramètres physiques des diélectriques. L'apport d'observations TEM serait notamment souhaitable pour valider les valeurs d'épaisseurs physiques que nous considérons.

Dans la suite de cette étude, nous considérerons dans les différentes simulations les nouveaux paramètres, définis pour optimiser l'accord théorie - expérience dans l'empilement **A**. Toute modification sera signalée comme telle.

### 1.5.3 Simulation du courant de grille de l'empilement B

Dans le paragraphe 1.5.1, nous avons observé d'importantes différences entre les relations  $I_g(Q_{\text{sc}})$  des empilements **A** et **B**. Ces différences semblent caractéristiques d'un effet dipôle qui tendrait à modifier les hauteurs de barrière du  $\text{HfO}_2$  d'une valeur que nous noterons  $\Delta\phi$ . Dans le cas idéal décrit en Figure 4.1 (page 133), le décalage  $\Delta W_{\text{FeTiN}} = 370$  mV est intégralement dû au dipôle, conduisant à l'égalité  $\Delta\phi = \Delta W_{\text{FeTiN}}$ .

En pratique, une part du décalage de  $V_{\text{FB}}$  mesuré peut être due à la présence de charges fixes dans l'empilement, et la grandeur  $\Delta W_{\text{FeTiN}}$  ne peut à elle seule rendre compte de l'importance du dipôle ( $\Delta W_{\text{FeTiN}} > \Delta\phi$  dans ce cas). L'analyse de la conduction électrique et la comparaison du courant expérimental avec la théorie s'avèrent donc indispensable pour juger du décalage de hauteurs de barrière  $\Delta\phi$ .

4. Nous rappelons que dans un procédé froid (gate last), l'épaisseur  $t_{\text{IL, chimique}}$  extraite était de l'ordre de 9 Å.

## 1. Etude de l'additif MgO

La connaissance de  $\Delta\phi$  permettra, après comparaison avec  $\Delta W_{\text{FeTiN}}$ , de conclure quant aux origines physiques de  $\Delta W_{\text{FeTiN}}$  (dipôle ou charges fixes).

Dans ce paragraphe, nous cherchons à quantifier le décalage de hauteurs de barrières du  $\text{HfO}_2$  après incorporation de MgO. Le dipôle Magnésium, d'épaisseur ultra-mince, ne sera pas modélisé comme une troisième couche : ses paramètres nous sont totalement inconnus et introduire un troisième matériau dans la simulation (en plus de l'IL et du  $\text{HfO}_2$ ) reviendrait à augmenter de manière conséquente le nombre de paramètres d'ajustement. Nous ne nous attendons donc pas à reproduire fidèlement le courant de grille mais plutôt à rendre compte de son niveau et ainsi dégager certaines tendances.

Hypothèse	$t_{\text{HfO}_2}$	$\varepsilon_{\text{HfO}_2}$	$t_{\text{IL}}$	$\varepsilon_{\text{IL}}$	EOT
I) Recroissance IL plus faible	2,25 +0,3 nm	$20 \varepsilon_0$	1,23 nm	$5 \varepsilon_0$	1,46 nm
II) “ $\kappa$ -boost” $\text{HfO}_2$	2,25 +0,3 nm	22,5 $\varepsilon_0$	1,31 nm	$5 \varepsilon_0$	1,46 nm
Référence $\text{HfO}_2$ ( <b>A</b> )	2,25 nm	$20 \varepsilon_0$	1,31 nm	$5 \varepsilon_0$	1,46 nm

TABLEAU 4.3 – Stratégies de simulation retenues pour le calcul du courant tunnel dans l'empilement MgO (empilement **B**). Les paramètres notés en rouge sont les seuls paramètres qui varient entre les 2 simulations

Le Tableau 4.3 résume les 2 stratégies de simulation retenues, selon l'hypothèse choisie pour expliquer l'invariance d'EOT malgré l'incorporation de 3Å MgO. Ne modélisant pas de couche diélectrique spécifique au dipôle dans nos simulations de courant, nous avons choisi de considérer dans les 2 hypothèses une couche  $\text{HfO}_2$  de 2,25 + 0,3 nm d'épaisseur pour rendre compte de l'épaisseur physique totale attendue. Les autres paramètres de simulation sont les mêmes que dans l'empilement **A** (colonne de droite du Tableau 4.2).

A partir de ces 2 ensembles de paramètres (hypothèses I et II), l'accord simulation - expérience est assuré en ajustant uniquement le décalage de hauteurs de barrière  $\Delta\phi$  dû au dipôle :

$$\begin{aligned}\phi_{\text{e,HfO}_2} &= 1,8 \text{ eV} + \Delta\phi, \\ \phi_{\text{h,HfO}_2} &= 2,93 \text{ eV} - \Delta\phi\end{aligned}\tag{4.1}$$

Les résultats de simulation sont représentés en Figure 4.8 et comparés à la caractéristique  $I_g(Q_{\text{sc}})$  expérimentale de l'empilement **B**.

### 1. Analyse en inversion ( $Q_{\text{sc}} < 0$ )

En inversion, le courant de grille est un courant d'électrons venant de la bande de conduction du Silicium, sensible à la hauteur de barrière entre les bandes de conduction du Silicium et du  $\text{HfO}_2$ .

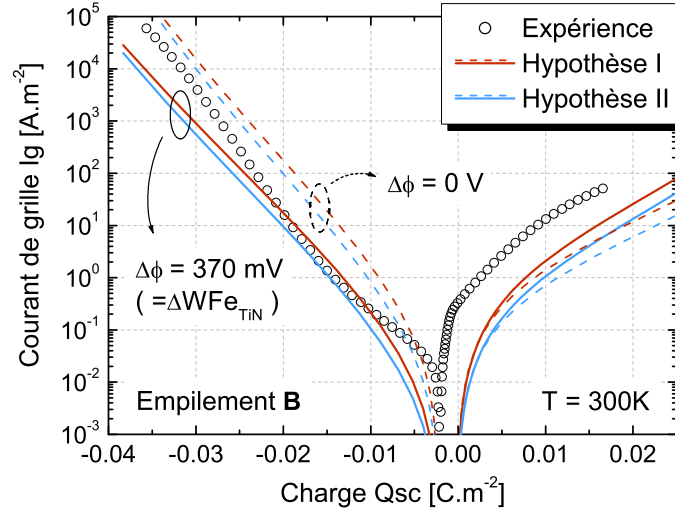


FIGURE 4.8 – Caractéristiques  $I_g(Q_{sc})$  expérimentale et simulées de l'empilement **B** à  $T = 300\text{K}$ . Les traits pleins rouge et bleu sont les résultats de simulation suivant les hypothèses I et II, respectivement, en prenant en compte un décalage de hauteur de barrière  $\Delta\phi = \Delta W_{\text{FeTiN}} = 370\text{ mV}$ . Les pointillés montrent les résultats de simulation utilisant les mêmes ensembles de paramètres, mais avec  $\Delta\phi = 0\text{ mV}$ .

Parmi les différentes stratégies de simulation, considérer une limitation de la recroissance d'oxyde d'interface et une augmentation de  $\phi_{\text{e,HfO}_2}$  d'un écart  $\Delta\phi = \Delta W_{\text{FeTiN}}$  (hypothèse I, trait plein rouge) sont les 2 hypothèses qui permettent d'expliquer au mieux le niveau de courant en inversion. Le rôle du dipôle sur le décalage de tension de bandes plates est ainsi souligné, et seule cette hypothèse permet un ajustement similaire à celui obtenu dans l'empilement **A**. Ce résultat est confirmé en observant les simulations n'intégrant pas de décalage de hauteur de barrière : dans ce cas, la simulation tunnel surestime fortement le courant de grille (trait pointillé rouge).

Ces analyses sont néanmoins à remettre dans le contexte d'une très faible connaissance de l'empilement, et d'une stratégie de simulation beaucoup moins poussée et précise que celle proposée dans le chapitre 3. La composition chimique de l'empilement de grille **B** restant sujette à caution, nous concluons seulement qu'un décalage  $\Delta\phi = \Delta W_{\text{FeTiN}} = 370\text{ mV}$  des hauteurs de barrière  $\text{HfO}_2$  permet de rendre compte du courant de grille. Ce résultat est cohérent avec la présence d'un dipôle à l'interface IL - high- $\kappa$ . Nous remarquons aussi que les faibles différences de paramètres entre l'hypothèse I et l'hypothèse II conduisent à de faibles écarts sur les niveaux de courant simulés. Au vu des nombreuses approximations faites, il est délicat de conclure sur le phénomène physique prédominant à l'origine de la valeur d'EOT de l'empilement **B**.

## 2. Analyse en accumulation ( $Q_{sc} > 0$ )

Pour des tensions de grille négatives, l'effet dipôle attendu est une diminution

## 1. Etude de l'additif MgO

de la hauteur de barrière  $\text{HfO}_2$  vue par les trous de la bande de valence du Silicium.

Néanmoins, les simulations sous-estiment fortement le courant expérimental en régime d'accumulation, y compris celles incluant l'effet dipôle : la diminution de  $\phi_{\text{h,HfO}_2}$  d'une valeur maximale  $\Delta\phi = \Delta W_{\text{FeTiN}}$  ne suffit pas à expliquer un tel niveau de courant. L'analyse physique de cette observation est délicate en raison des nombreuses approximations que nous avons effectué. Une meilleure connaissance de l'empilement MgO (notamment les épaisseurs physique des matériaux et les paramètres tunnel du dipôle) permettrait d'établir si cet écart est lié à une modification de la nature du  $\text{HfO}_2$  après introduction de MgO dans l'empilement.

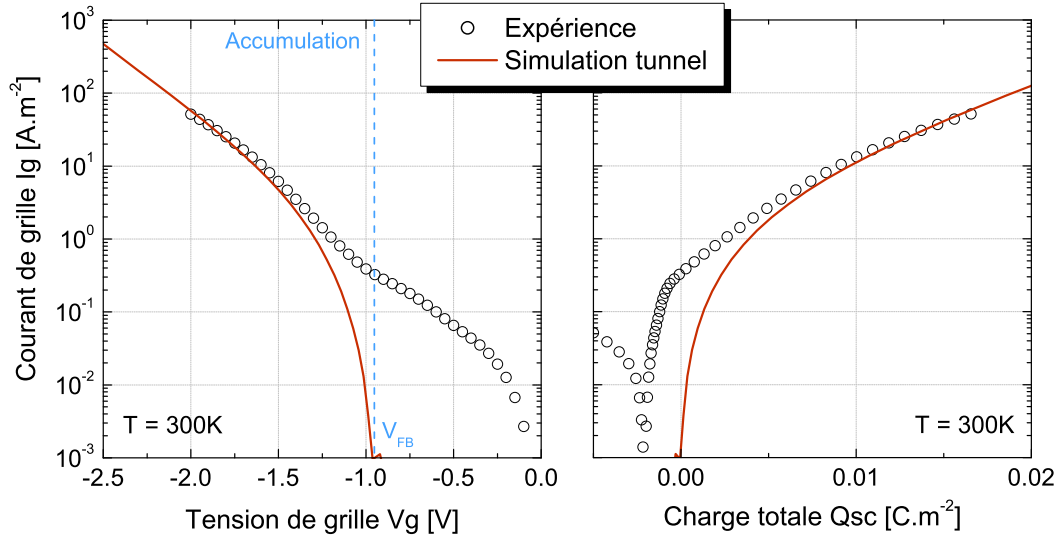


FIGURE 4.9 – Caractéristiques  $I_g(V_g)$  et  $I_g(Q_{sc})$  expérimentales et simulées de l'empilement B à  $T = 300\text{K}$ . Les paramètres de simulation sont ceux de l'hypothèse I, avec  $\Delta\phi = 370\text{ mV}$  et une masse tunnel de Franz  $m_{\text{f,HfO}_2} = 0,15 m_0$ .

Ces observations soulignent donc que le dipôle à l'interface IL -  $\text{HfO}_2$  conditionne la conduction électrique dans un empilement MgO. Néanmoins, notre analyse permet uniquement de dégager une tendance globale : la mauvaise connaissance de l'empilement ne permet pas une analyse fine de la conduction électrique et une étude électrique sur un unique empilement ne permet pas d'expliquer quantitativement le courant de grille observé.

Enfin, la Figure 4.9 montre un exemple de simulation du courant 2D de trous avec les paramètres de l'hypothèse I (incluant l'effet dipôle  $\Delta\phi = 370\text{ mV}$ ), pour lequel la masse tunnel de Franz dans  $\text{HfO}_2$  a été abaissée d'une valeur initiale  $m_{\text{f,HfO}_2} = 0,2 m_0$  à  $m_{\text{f,HfO}_2} = 0,15 m_0$ . Un tel paramètre permet de rendre compte du courant en accumulation ( $V_g < V_{\text{FB}}$  et  $Q_{sc} > 0\text{ C.m}^{-2}$ ) mais sa justification "physique" est

évidemment très délicate en raison des nombreuses approximations que nous avons déjà effectué. Elle permet toutefois de montrer que le courant 2D de trous avec des paramètres adaptés est à l'origine du courant en accumulation.

Dans des tensions comprises entre  $V_{FB}$  et 0 V, la présence d'une composante inconnue non thermiquement activée est une nouvelle fois soulignée. Dans cette gamme de tension, la charge dans le semiconducteur est faible (régime de désertion), et aucune des composantes au courant de grille décrites en introduction du chapitre 3 n'explique cette conduction. Une conduction assistée par les pièges d'interface est également à exclure au vu de leur faible valeur (Figure 4.3). Nous laissons donc ouverte la question de l'origine de ce courant.

### 1.6 Conclusion de l'étude

L'introduction de MgO dans un empilement high- $\kappa$  répond donc aux attentes : un décalage de la tension de bandes plates de 370mV (et donc de la tension de seuil) est observé, sans dégrader le courant de grille à  $V_g = \text{cte}$ .

A l'origine de ce résultat, un dipôle à l'interface IL -  $\text{HfO}_2$  permet d'augmenter conjointement le niveau de Fermi du TiN (décalage de la tension de seuil) et les hauteurs de barrière du  $\text{HfO}_2$  vues par les porteurs dans le Silicium (modification de la conduction électrique de l'empilement). A charge constante, l'effet du dipôle sur les paramètres  $\text{HfO}_2$  diminue le courant de grille en inversion (augmentation de la hauteur de barrière), compensant ainsi l'augmentation liée à la diminution de tension de seuil. Le phénomène inverse est observé en accumulation.

Les limites d'une étude électrique réalisées sur un unique empilement ont toutefois été soulignées, notamment en raison d'une mauvaise connaissance des paramètres intrinsèques de l'IL et du  $\text{HfO}_2$ . Les résultats quantitatifs proposés sont donc susceptibles d'être améliorés en s'appuyant sur une analyse physico-chimique de l'empilement.

## 2 Etude de l'additif La

De même que MgO, l'introduction de Lanthane dans un empilement high- $\kappa$  est envisagée pour optimiser la tension de seuil des transistors nMOS. Après ajout de cette terre rare sous forme  $\text{La}_2\text{O}_3$ , nous attendons un décalage du niveau de Fermi apparent du TiN vers un comportement  $n^+$  [15]. Le mécanisme attendu est le même que celui représenté en introduction de ce chapitre (Figure 4.1, page 133), à savoir un effet dipôle à l'interface IL - high- $\kappa$  modifiant les paramètres apparents du métal de grille et du high- $\kappa$  et conduisant à décaler  $V_{\text{FB}}$  d'une valeur  $\Delta W_{\text{FeTiN}}$  [16, 17, 18, 19].

Dans ce paragraphe, nous nous appuyons sur l'étude de dispositifs Si - IL -  $\text{La}_2\text{O}_3$  -  $\text{HfO}_2$  - TiN pour mesurer l'influence du Lanthane sur le comportement électrique global des empilements et en particulier la conduction.

### 2.1 Description des empilements étudiés

Trois transistors nMOS ont été réalisés sur substrat Silicium bulk  $\langle 100 \rangle$  dopé p ( $N_a = 3.10^{23} \text{ m}^{-3}$ ). L'oxyde d'interface  $\text{SiO}_2$  présente une épaisseur variable sur les 3 plaques de Silicium testées : après une croissance thermique RTO d'environ 6nm, un nettoyage graduel à l'aide de HF a permis l'obtention d'un profil biseauté, comme schématisé Figure 4.10. Une zone d'épaisseur  $t_{\text{IL}}$  constante est toutefois présente, d'épaisseur visée égale à  $6\text{\AA}$ <sup>5</sup>. L'ensemble des dispositifs présentés dans ce paragraphe appartient à cette zone dite "EOT<sub>min</sub>" des plaques testées.

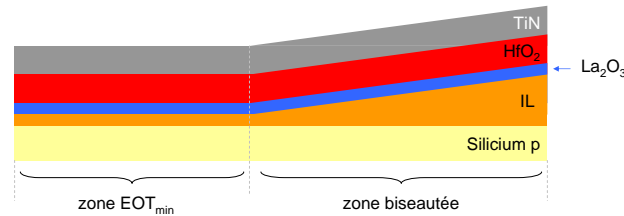


FIGURE 4.10 – Vue en coupe schématique d'une plaque de Silicium Si - IL -  $\text{La}_2\text{O}_3$  -  $\text{HfO}_2$  - TiN avant recuit avec biseau d'oxyde interfacial.

Les 3 empilements diffèrent par la nature de la couche  $\text{La}_2\text{O}_3$  déposée après la réalisation du biseau :

- les empilements notés **C** et **D** présentent une épaisseur variable de  $\text{La}_2\text{O}_3$ , respectivement de 0,25 et 0,5 nm,
- l'empilement **E** présente également une couche  $\text{La}_2\text{O}_3$  de 0,5 nm, mais pour laquelle un dépôt enrichi en oxygène est suspecté.

Un dépôt ALD de 2nm  $\text{HfO}_2$  a ensuite été réalisé, avant la réalisation d'une grille TiN PVD 5nm et un recuit d'activation des dopants à  $1050^\circ\text{C}$  (procédé gate

5. La réalisation d'une interface biseautée est notamment utile pour étudier l'évolution de  $V_{\text{FB}}$  en fonction de l'EOT [3].



first). Le Tableau 4.4 résume les caractéristiques des 3 empilements étudiés.

Empilement	C	D	E
Dopage Silicium p	$3.10^{23} \text{ m}^{-3}$	$3.10^{23} \text{ m}^{-3}$	$3.10^{23} \text{ m}^{-3}$
IL	RTO	RTO	RTO
$\text{La}_2\text{O}_3$	0,25 nm	0,5 nm	0,5 nm (+ oxygène ?)
$\text{HfO}_2$	2nm ALD	2nm ALD	2nm ALD
Grille	TiN PVD 5nm	TiN PVD 5nm	TiN PVD 5nm
Recuit	1050°C	1050°C	1050°C

TABLEAU 4.4 – Caractéristiques des empilements nMOS avec  $\text{La}_2\text{O}_3$  caractérisés.

## 2.2 Etat de l'art

Les mécanismes physico-chimiques en jeu dans un empilement  $\text{La}_2\text{O}_3$  -  $\text{HfO}_2$  font actuellement l'objet de nombreuses études dans la littérature. Le comportement des atomes de Lanthane au cours du recuit n'est pas totalement clair et apparaît fortement sensible aux conditions de process. Nous nous proposons tout d'abord de faire un bref état de l'art de l'incorporation de Lanthane dans un empilement high- $\kappa$  avant d'analyser les caractéristiques électriques des empilements **C**, **D** et **E**.

Durant le recuit, les atomes de Lanthane sont susceptibles de réagir avec les composés chimiques du high- $\kappa$   $\text{HfO}_2$  pour former le diélectrique  $\text{HfLaO}$  [20]. Ce matériau présente une permittivité supérieure au  $\text{HfO}_2$  dont la valeur semble varier en fonction de la quantité de Lanthane dans l'empilement (entre 20 et  $30 \epsilon_0$  d'après l'étude expérimentale présentée dans [16]). L'apparition de ce matériau favorise donc une diminution d'EOT, confirmée expérimentalement dans [21]. Il est néanmoins difficile d'établir avec certitude la quantité d'Hafnium qui interagit avec le Lanthane et donc la proportion restante de  $\text{HfO}_2$  après formation de  $\text{HfLaO}$ . A noter que certaines études considèrent une migration des atomes de Silicium, conduisant en la formation d'un diélectrique de type  $\text{HfLaSiO}$  [21].

Les atomes de Lanthane diffusent également à travers la couche  $\text{HfO}_2$  pour former un dipôle à l'interface high- $\kappa$  - IL. Cet effet dipôle est certes établi dans la littérature [16, 17, 18, 19], mais les mécanismes physiques à son origine font l'objet d'un débat :

- Certaines études attribuent l'effet dipôle à la formation de liaisons La–O et Hf–O à l'interface high- $\kappa$  - IL, liaisons fortement polaires en raison de la différence d'électronégativité entre Hf et O d'une part et La et O d'autre part [13, 18, 22].
- L'équipe d'Akira Toriumi (Université de Tokyo) montre néanmoins les limites de ce modèle pour expliquer les décalages de  $V_{\text{FB}}$  observés [17, 19]. Selon eux, la concentration d'atomes d'oxygène est plus importante dans l'IL que dans le  $\text{HfO}_2$  : la diffusion d'éléments  $\text{O}^{2-}$  de l'IL vers le high- $\kappa$  est alors indispensable pour assurer la stabilisation structurale de l'interface entre les 2 matériaux.

## 2. Etude de l'additif La

Cette diffusion d'espèces a lieu sur une courte distance de part et d'autre de l'interface, induisant le dipôle observé expérimentalement.

Enfin, les travaux de Morooka et al. [21] montrent la concomitance de 2 phénomènes, à savoir une localisation des atomes de Lanthane à la fois à l'interface HfO<sub>2</sub> - IL (dipôle) et en volume du HfO<sub>2</sub> (formation de HfLa(Si)O).

### 2.3 Influence de l'épaisseur La<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (empilements C et D)

#### 2.3.1 Analyse des paramètres $V_{FB}$ et EOT

Le Tableau 4.5 résume les valeurs d'EOT et  $V_{FB}$  extraites à partir des caractéristiques  $C(V_g)$  ( $T = 300$  K).

Empilement	C	D
EOT	1,39 nm	1,38 nm
$V_{FB}$	-0,923 V	-1,074 V

TABLEAU 4.5 – Paramètres électriques des empilements C et D extraits à 300K.

Entre les empilements C et D, augmenter l'épaisseur d'oxyde de Lanthane de 2,5Å (empilement C) à 5Å (empilement D) ne change pas significativement la valeur d'EOT, malgré une épaisseur physique plus importante de 2,5Å. Cette observation peut être expliquée soit par la forte permittivité de l'oxyde La<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (environ égale à  $30\epsilon_0$  d'après [10], c'est-à-dire un EOT de 0,3Å pour 2,5Å d'épaisseur physique), soit par la formation de HfLa(Si)O.

L'absence d'empilement de référence HfO<sub>2</sub> nous amène à comparer les empilements A (référence HfO<sub>2</sub> du paragraphe précédent) et C (0,25 nm La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) pour juger de l'apport du Lanthane sur le décalage de  $V_{FB}$ . Un écart  $\Delta W_{FeTiN}$  de 330mV est observé, cohérent avec un comportement  $n^+$  de l'empilement de grille. Cette valeur augmente de 150mV quand une couche La<sub>2</sub>O<sub>3</sub> plus épaisse est utilisée (cas de l'empilement D). Le décalage de  $V_{FB}$  apparaît donc dépendant de l'épaisseur de la couche et donc de la quantité de Lanthane dans l'empilement, conformément aux analyses de Morooka et al. [21].

A ce stade de l'étude, il est toutefois prématuré d'attribuer la modification du travail de sortie effectif du TiN à un seul effet dipôle, des charges fixes dans l'empilement pouvant également décaler la tension de bandes plates. Seule l'analyse de la conduction électrique nous paraît à même d'éclaircir le lien entre concentration totale de Lanthane dans l'empilement, décalage de  $V_{FB}$  et ampleur  $\Delta\phi$  du dipôle.

#### 2.3.2 Analyse de la conduction électrique

Comme nous l'avons observé dans le cas du MgO, un éventuel dipôle à l'interface IL - HfO<sub>2</sub> induirait une modification des hauteurs de barrière  $\phi_{e,HfO_2}$  et  $\phi_{h,HfO_2}$  vues par les porteurs du Silicium. Dans le cas d'un empilement Lanthane, nous les

noterons  $\phi_{e,high-\kappa}$  et  $\phi_{h,high-\kappa}$  en raison d'une mauvaise connaissance de la nature chimique exacte du high- $\kappa$ .

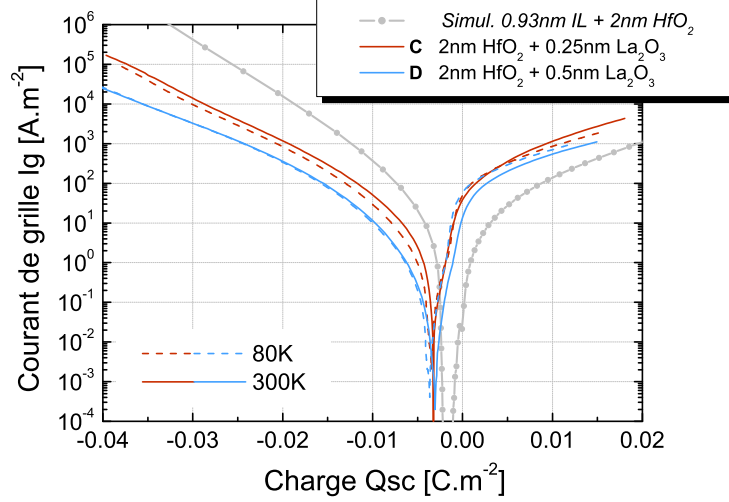


FIGURE 4.11 – Caractéristiques  $I_g(Q_{sc})$  expérimentales des empilements **C** et **D** mesurées à 80 et 300K, comparées à la simulation du courant tunnel à 300K dans un empilement référence  $\text{SiO}_2$  -  $\text{HfO}_2$ .

La Figure 4.11 représente les caractéristiques  $I_g(Q_{sc})$  expérimentales des empilements **C** et **D**, mesurées à 80 et 300K. L'absence d'empilement de référence nous conduit à simuler un empilement  $\text{HfO}_2$  "virtuel" pour évaluer l'impact de l'introduction de Lanthane sur la conduction électrique. Dans cette approche, définir les paramètres de cet empilement est délicat, et les observations que nous ferons par la suite ne seront qu'indicatives et en aucun cas quantitatives. Au vu des conditions de process, nous avons choisi les paramètres de simulation suivant :

- paramètres  $\text{HfO}_2$  identiques à ceux définis dans le chapitre 3 (permittivité et paramètres tunnel) pour une épaisseur  $t_{\text{HfO}_2} = 2 \text{ nm}$ ,
- EOT égal à 1,39 nm, soit le même ordre de grandeur que les EOT des empilements Lanthane **C** et **D** (1,39 et 1,38 nm respectivement).
- oxyde interfacial considéré comme étant du  $\text{SiO}_2$  "pur" ( $\epsilon_{\text{IL}} = 3,9 \epsilon_0$ ) en raison du procédé de croissance RTO, conduisant à une épaisseur  $t_{\text{IL}} = 0,93 \text{ nm}$  à partir de la valeur d'EOT choisie (la différence avec les 6 Å visés étant attribuée à une recroissance d'oxyde),
- paramètres tunnel de l'IL identiques aux paramètres du  $\text{SiO}_2$  RTO définis dans le chapitre 3,

Dans les 2 empilements Lanthane, nous n'observons pas d'activation thermique significative et concluons que le courant de grille est assuré par un mécanisme soit de type tunnel, soit TAT élastique. Les niveaux de courant mesurés nous conduisent aux observations suivantes :

## 2. Etude de l'additif La

---

### 1. Comparaison référence $\text{HfO}_2$ / empilements Lanthane

En inversion, le courant dans l'empilement référence est plus important que dans les empilements **C** et **D**, et un comportement inverse est observé en accumulation. Comme dans un empilement  $\text{MgO}$ , cette modification dissymétrique de la conduction électrique semble caractéristique d'une modification  $\Delta\phi$  des hauteurs de barrière  $\phi_{e,\text{high}-\kappa}$  et  $\phi_{h,\text{high}-\kappa}$  et donc de la présence d'un dipôle. Néanmoins, ces différences de courant doivent être pondérées par une éventuelle modification des paramètres high- $\kappa$  après introduction de Lanthane (formation de  $\text{HfLa}(\text{Si})\text{O}$ ) et par les incertitudes pesant sur les paramètres de l'empilement référence (notamment la nature de l'IL). Ces hypothèses risquant de fausser l'extraction de paramètres, décorréler ces phénomènes et quantifier l'écart  $\Delta\phi$  uniquement dû au dipôle apparaît risqué et prématuré à ce stade de l'étude.

### 2. Comparaison empilement **C** / empilement **D**

- En inversion, l'empilement **D** présente un niveau de courant plus faible que dans l'empilement **C**. Un effet dipôle plus important lié à l'augmentation de Lanthane (augmentation de  $\phi_{e,\text{high}-\kappa}$ ) est susceptible d'expliquer cet écart et serait cohérent avec le décalage de  $V_{\text{FB}}$  observé entre les 2 structures. Toutefois, l'hypothèse d'une épaisseur physique plus importante de l'empilement **D** (0,5 nm  $\text{La}_2\text{O}_3$ ) ne doit pas être écartée pour expliquer cette différence de courant.
- En accumulation, le courant de l'empilement **D** est légèrement plus faible que dans l'empilement **C**. Un tel écart est incohérent avec une augmentation de l'effet dipôle entre les empilements **C** et **D**, ce phénomène s'accompagnant normalement d'une augmentation du courant de grille (baisse de  $\phi_{h,\text{high}-\kappa}$ ). Seule l'épaisseur physique plus importante de l'empilement **D** semble donc à l'origine de cette observation.

Malheureusement, l'absence d'empilement référence  $\text{HfO}_2$  sans Lanthane empêche une détermination précise des paramètres IL et  $\text{HfO}_2$  (épaisseurs physiques, permittivité et paramètres tunnel). Cela entraîne une méconnaissance des paramètres des empilements **C** et **D** (épaisseur physique de l'IL, permittivité du  $\text{HfO}_2$  après introduction de Lanthane, paramètres tunnel du  $\text{HfLa}(\text{Si})\text{O}...$ ), ne permettant donc pas de modéliser précisément le courant et d'évaluer le dipôle  $\Delta\phi$ . Nous avons tout de même simulé le courant de grille dans les empilements "idéaux" suivants, en se basant sur les caractéristiques de l'empilement  $\text{HfO}_2$  virtuel que nous avons considéré précédemment :

- un empilement présentant une épaisseur physique plus importante de  $2,5\text{\AA}$ , un EOT de 1,39 nm et un effet dipôle  $\Delta\phi = 330\text{ mV}$  (cas de l'empilement **C**),
- un empilement présentant une épaisseur physique plus importante de  $5\text{\AA}$ , un EOT de 1,38 nm et un effet dipôle  $\Delta\phi = 480\text{ mV}$  (cas de l'empilement **D**),

Ces résultats de simulation correspondent à des cas idéaux pour lesquels le décalage de tension de bandes plates  $\text{WFeTiN}$  serait entièrement dû à un dipôle  $\Delta\phi$ . Ils sont comparés avec les caractéristiques électriques des empilements **C** et **D**

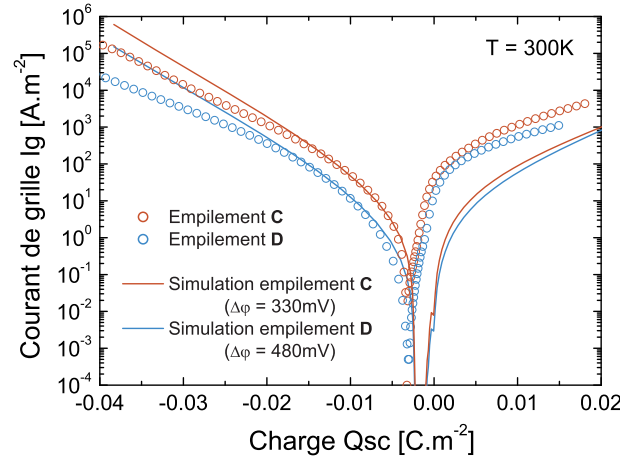


FIGURE 4.12 – Caractéristiques  $I_g(Q_{sc})$  expérimentales des empilements **C** et **D** mesurées à 300K, comparées aux résultats de simulation du courant tunnel dans des empilements Lanthane “idéaux”, ne différant de l’empilement référence  $\text{HfO}_2$  que par le dipôle  $\Delta\phi$  et l’épaisseur physique considérés.

en Figure 4.12. Si les niveaux de courant ne correspondent ni en forte inversion ( $Q_{sc} < -0,02 \text{ C.m}^{-2}$ ) ni en accumulation (sans doute en raison des nombreuses incertitudes précédemment citées), les caractéristiques simulées reproduisent étonnamment bien l’évolution du courant après introduction de Lanthane. En inversion, un dipôle  $\Delta\phi = W\text{Fe}_{\text{TIN}}$  explique la baisse du courant observée entre les empilements **C** et **D** (augmentation de la hauteur de barrière  $\phi_{e,\text{high}-\kappa}$ ). L’effet dipôle apparaît donc d’autant plus important que la couche  $\text{La}_2\text{O}_3$  est épaisse. En accumulation, une augmentation du dipôle entre les empilements **C** et **D** est supposé favoriser une augmentation de courant dans l’empilement **D** (hauteur de barrière  $\phi_{h,\text{high}-\kappa}$  plus faible). Toutefois, en raison de la différence d’épaisseur physique entre les empilements, le courant de grille simulé dans l’empilement **C** reste supérieur et montre une excellente cohérence avec l’expérience.

Nous concluons donc que le Lanthane induit un dipôle à l’interface IL - high- $\kappa$  d’autant plus important que la couche  $\text{La}_2\text{O}_3$  initialement déposée est épaisse. Malgré l’absence d’empilement de référence  $\text{HfO}_2$ , l’impact de cet effet sur le transport tunnel est bien reproduit par la simulation et souligne la pertinence des paramètres  $\text{HfO}_2$  proposés dans le chapitre 3.

## 2.4 Influence du procédé de dépôt (empilements D et E)

Les empilements **D** et **E** présentent les mêmes caractéristiques (2 nm  $\text{HfO}_2$  et 0,5 nm  $\text{La}_2\text{O}_3$ ), la seule différence résidant dans l’utilisation d’un dépôt  $\text{La}_2\text{O}_3$  pour lequel nous suspectons un enrichissement en ozone  $\text{O}_3$  (empilement **E**). Le Tableau

## 2. Etude de l'additif La

4.6 résume les valeurs EOT et  $V_{FB}$  expérimentales extraites des caractéristiques  $C(V_g)$  ( $T = 300$  K).

Empilement	<b>D</b>	<b>E</b>
EOT	1,38 nm	1,68 nm
$V_{FB}$	-1,074 V	-1,156 V

TABLEAU 4.6 – Paramètres électriques des empilements **D** et **E** extraits à 300K.

Il apparaît que la différence de procédé de dépôt induit une recroissance d'EOT de 0,3 nm entre les empilements **D** et **E**. Cette observation semble caractéristique d'une recroissance de l'oxyde d'interface plus importante dans l'empilement **E**, et confirmerait l'enrichissement en oxygène du procédé de dépôt. L'IL présentant une nature  $\text{SiO}_2$  (croissance RTO), il est légitime de considérer qu'une augmentation de 0,3 nm d'EOT équivaut à une recroissance de 0,3 nm d'épaisseur physique  $\text{SiO}_2$ .

De plus, nous observons dans cet empilement une diminution de  $V_{FB}$  de 82 mV. Deux phénomènes sont susceptibles d'être à l'origine de cet écart :

- Les atomes d'oxygène des matériaux  $\text{HfO}_2$  et  $\text{La}_2\text{O}_3$  qui participent à l'oxydation du Silicium laissent place à des lacunes d'oxygène, chargées positivement [23]. La recroissance plus importante dans l'empilement **E** induirait ainsi un plus grand nombre de lacunes, décalant d'autant la valeur de tension de bandes plates.
- Dans l'empilement **E**, une plus grande concentration d'éléments oxygène favoriserait une augmentation du nombre de liaisons polaires La–O / Hf–O, et donc d'un effet dipôle (sous réserve d'un dipôle expliqué par cette hypothèse [18]).

Quantifier le seul dipôle  $\Delta\phi$  permettrait de mesurer l'influence respective de ces 2 phénomènes sur le décalage de  $V_{FB}$ . L'analyse du courant de grille et des caractéristiques expérimentales  $I_g(Q_{sc})$  s'avère une nouvelle fois nécessaire. La Figure 4.13 représente les caractéristiques des empilements **D** et **E**, mesurées à 80 et 300K. Comme dans les empilements **C** et **D**, le courant de grille de l'empilement **E** ne présente aucune activation thermique : un mécanisme tunnel ou TAT élastique est donc à l'origine de la conduction.

L'empilement **E** présente un niveau de courant inférieur d'environ 1,5 décades à l'empilement **D**, et ce tant en régime d'inversion que d'accumulation. La différence observée semble liée à la recroissance d'oxyde interfacial dans l'empilement **E**, plus importante de 3 Å que dans l'empilement **D**. Cet écart est à comparer aux résultats obtenus dans le chapitre précédent : nous avons alors étudié les empilements *vi* et *vii*, qui présentent un écart d'épaisseur physique  $\text{SiO}_2$  de 4,2 Å et un écart de courant à charge constante d'environ une décade (voir la Figure 3.24, page 93). Cet écart avait alors été vérifié par comparaison à la simulation tunnel.

Les différences observées entre les empilements **D** et **E** ne semblent donc pas

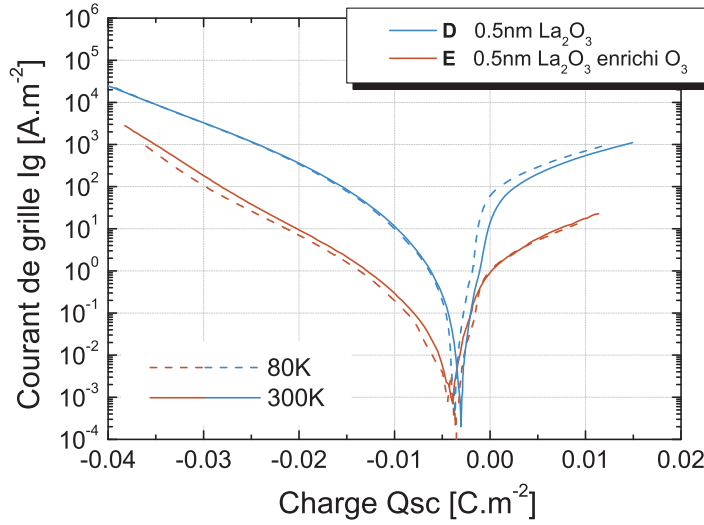


FIGURE 4.13 – Caractéristiques  $I_g(Q_{sc})$  expérimentales des empilements **D** et **E** mesurées à 80 et 300K.

uniquement liées à une différence d'épaisseur  $\text{SiO}_2$ . Parmi les hypothèses pouvant expliquer cette différence de 1,5 décades, citons :

- la recroissance soit d'un oxyde sous-stœchiométrique soit d'un silicate de Lanthane, de permittivité plus élevée que celle du  $\text{SiO}_2$  "pur" (conduisant à une différence d'épaisseur physique plus importante que la différence d'EOT),
- une modification des paramètres tunnel du high- $\kappa$  en raison de l'enrichissement en oxygène.

Au vu des écarts de courant entre **D** et **E**, il est difficile d'expliquer le décalage de  $V_{FB}$  par un renforcement de l'effet dipôle. L'évolution de la conduction entre les 2 structures testées apparaît symétrique par rapport à  $Q_{sc} = 0$ , et une modification  $\Delta\phi$  des hauteurs de barrière semble à première vue exclue. Néanmoins, l'effet dipôle maximal envisagé est égal à 82 meV, et une telle évolution des hauteurs de barrière serait peu perceptible sur nos caractéristiques expérimentales. Il est donc difficile et risqué de décorréler les différents phénomènes à l'origine de l'écart de tension de bandes plates entre les empilements **D** et **E**.

## 2.5 Conclusion de l'étude

Nous avons vérifié expérimentalement que l'introduction de Lanthane dans un empilement high- $\kappa$  permet de diminuer la tension de bandes plates, et donc la tension de seuil. Ce décalage apparaît dépendant de la quantité d'oxyde de Lanthane déposée : l'effet recherché est en effet plus important dans l'empilement **D** (5Å de  $\text{La}_2\text{O}_3$  et  $\Delta W_{\text{FeTiN}} = -480 \text{ meV}$ ) que dans l'empilement **C** (2,5Å de  $\text{La}_2\text{O}_3$  et

## 2. Etude de l'additif La

---

$\Delta W_{\text{FeTiN}} = -330 \text{ meV}$ ).

L'analyse électrique des empilements souligne également un autre avantage de l'introduction de Lanthane : outre une optimisation de la tension de seuil du transistor, elle permet de maintenir un faible EOT, et ce en raison de la réaction chimique entre le  $\text{HfO}_2$  et le Lanthane (formation d'un diélectrique  $\text{HfLa}(\text{Si})\text{O}$  de permittivité plus élevée que  $\text{HfO}_2$ ).

Le décalage de  $V_{\text{FB}}$  observé après introduction de Lanthane peut conjointement s'expliquer par un dipôle à l'interface IL - high- $\kappa$  et par la présence de charges fixes dans l'empilement. L'analyse du courant de grille permet théoriquement de décorrélérer ces 2 contributions en quantifiant le décalage de hauteurs de barrière uniquement lié à l'effet dipôle  $\Delta\phi$ .

Au cours de l'étude présentée dans ce paragraphe, l'absence d'empilement de référence  $\text{HfO}_2$  ne nous a pas permis d'établir avec certitude les paramètres de l'IL et du  $\text{HfO}_2$ . Malgré tout, l'expertise acquise dans le chapitre 3 sur la nature d'un empilement IL -  $\text{HfO}_2$  - TiN s'est avérée concluante : grâce à la modélisation d'un empilement référence  $\text{HfO}_2$ , nous avons pu établir que les décalages de tension de bandes plates dans les empilements Lanthane ont pour unique origine un dipôle à l'interface IL - high- $\kappa$ .



### 3 Conclusions du chapitre 4

Cette étude a permis de mesurer l'influence de l'introduction de Magnésium et de Lanthane dans un empilement IL -  $\text{HfO}_2$  -  $\text{TiN}$ . Les analyses présentées dans ce chapitre reposent sur l'expertise de ce type d'empilement (acquise dans le chapitre 3), et sur l'ensemble des méthodes expérimentales précédemment développées.

Le principal effet attendu après ajout de  $\text{MgO}$  ou  $\text{La}_2\text{O}_3$  dans un empilement nMOS est un décalage  $n^+$  de la tension de seuil en raison d'un dipôle à l'interface high- $\kappa$  - IL. Ces additifs interagissent fortement avec les matériaux de l'empilement de grille et induisent des charges fixes supplémentaires, une modification des propriétés de conduction de l'empilement ou la formation de nouveaux diélectriques. Ces mécanismes sont fortement dépendants des conditions de process, et induisent des modifications de  $V_{\text{FB}}$ , d'EOT et de la conduction électrique.

L'apport des méthodes de caractérisation introduites dans les chapitres 2 et 3 (simulation Poisson-Schrödinger, mesures à basse température, séparation de porteurs, tracés  $I_g(Q_{\text{sc}})$  et modèle de courant tunnel) nous a permis d'établir les conclusions suivantes :

1. L'introduction de  $\text{MgO}$  dans un empilement  $\text{HfO}_2$  induit une diminution de tension de seuil de 370 mV et ne dégrade pas le courant de grille à une polarisation  $V_g$  donnée. La présence d'un effet dipôle  $\Delta\phi$  explique ces observations :
  - En inversion, l'augmentation attendue du courant 2D d'électrons à cause de la baisse de  $V_{\text{FB}}$  est compensée par une augmentation  $\Delta\phi$  de la hauteur de barrière  $\phi_{\text{e,HfO}_2}$ .
  - En accumulation, l'observation est inverse : la diminution attendue du courant 3D de trous en raison de la diminution de  $V_{\text{FB}}$  est compensée par une diminution  $\Delta\phi$  de la hauteur de barrière  $\phi_{\text{h,HfO}_2}$ . L'introduction de Magnésium semble toutefois contribuer à une modification des paramètres tunnel du high- $\kappa$ , rendant délicate la simulation du courant en accumulation.

La simulation tunnel développée dans le chapitre précédent nous a permis de quantifier cette modification  $\Delta\phi$  des hauteurs de barrière, et d'établir que la diminution de la tension de seuil après introduction de  $\text{MgO}$  est uniquement due à l'effet dipôle.

2. L'introduction de Lanthane induit également une diminution de la tension de seuil, du même ordre de grandeur que dans l'étude précédente et fonction de l'épaisseur de  $\text{La}_2\text{O}_3$  déposée. Mesurer précisément l'influence du Lanthane sur les paramètres d'un empilement s'est toutefois avéré délicat en raison de l'absence d'empilement de référence  $\text{HfO}_2$ . Nous avons néanmoins pu établir la présence d'un dipôle à l'interface IL - high- $\kappa$  à partir de la simulation du courant dans un empilement "virtuel"  $\text{HfO}_2$ . Cette approche prédictive souligne la pertinence des paramètres tunnel  $\text{HfO}_2$  proposés dans le chapitre 3, et permet d'attribuer le décalage de tension de bandes plates au seul effet dipôle.

Cette étude a également permis de mettre en évidence la nécessaire prise en

### 3. Conclusions du chapitre 4

---

compte de la pénétration des fonctions d'onde lors de l'extraction d'EOT, et la pertinence du modèle tunnel développé. En effet, les niveaux de courant ou les valeurs d'EOT que nous avons cherché à comparer étaient proches, et seule une approche précise a permis de dégager les origines physiques à l'origine de ces écarts.

Nous avons toutefois pu établir les limites de notre approche dès lors que l'empilement étudié présentait de multiples inconnues. Juger des effets de l'introduction de tel ou tel nouveau matériau nécessite donc la réalisation conjointe d'un empilement référence. Dans certains cas, des analyses physico-chimiques (en particulier des observations TEM) restent nécessaires pour valider ou infirmer les épaisseurs physiques et les valeurs de permittivité retenues au cours des simulations tunnel.

## Bibliographie

- [1] International Technology Roadmap for Semiconductors, "Process Integration, Devices, and Structures." Lien : [http://www.itrs.net/Links/2009ITRS/2009Chapters\\_2009Tables/2009\\_PIDS.pdf](http://www.itrs.net/Links/2009ITRS/2009Chapters_2009Tables/2009_PIDS.pdf) 131
- [2] T. Skotnicki, C. Fenouillet-Beranger, C. Gallon, F. Boeuf, S. Monfray, F. Payet, A. Pouydebasque, M. Szczap, A. Farcy, F. Arnaud, S. Clerc, M. Sellier, A. Cathignol, J.-P. Schoellkopf, E. Perea, R. Ferrant, and H. Mingam, "Innovative Materials, Devices, and CMOS Technologies for Low-Power Mobile Multimedia," *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 55, no. 1, pp. 96–130, 2008. 131
- [3] M. Charbonnier, C. Leroux, V. Cosnier, P. Besson, E. Martinez, N. Benedetto, C. Licitra, N. Rochat, C. Gaumer, K. Kaja, G. Ghibaudo, F. Martin, and G. Reimbold, "Measurement of Dipoles/Roll-Off /Work Functions by Coupling CV and IPE and Study of Their Dependence on Fabrication Process," *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 57, no. 8, pp. 1809 –1819, 2010. 131, 133, 147
- [4] K. Mistry, C. Allen, C. Auth, B. Beattie, D. Bergstrom, M. Bost, M. Brazier, M. Buehler, A. Cappellani, R. Chau, C.-H. Choi, G. Ding, K. Fischer, T. Ghani, R. Grover, W. Han, D. Hanken, M. Hattendorf, J. He, J. Hicks, R. Huessner, D. Ingerly, P. Jain, R. James, L. Jong, S. Joshi, C. Kenyon, K. Kuhn, K. Lee, H. Liu, J. Maiz, B. McIntyre, P. Moon, J. Neirynck, S. Pae, C. Parker, D. Parsons, C. Prasad, L. Pipes, M. Prince, P. Ranade, T. Reynolds, J. Sandford, L. Shifren, J. Sebastian, J. Seiple, D. Simon, S. Sivakumar, P. Smith, C. Thomas, T. Troeger, P. Vandervoorn, S. Williams, and K. Zawadzki, "A 45nm Logic Technology with High-k+Metal Gate Transistors, Strained Silicon, 9 Cu Interconnect Layers, 193nm Dry Patterning, and 100pc Pb-free Packaging," *IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, 10-12 2007, pp. 247 –250. 131
- [5] Ioffe Physico-Technical Institute : Physical Properties of Semiconductors. Lien : <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/Si/basic.html> 133
- [6] C. C. Fulton, T. E. Cook, G. Lucovsky, and R. J. Nemanich, "Interface instabilities and electronic properties of ZrO<sub>2</sub> on silicon (100)," *Journal of Applied Physics*, vol. 96, no. 5, pp. 2665–2673, 2004. 133
- [7] V. V. Afanasev, A. Stesmans, C. Zhao, M. Caymax, T. Heeg, J. Schubert, Y. Jia, D. G. Schlom, and G. Lucovsky, "Band alignment between (100) Si and complex rare earth / transition metal oxides," *Applied Physics Letters*, vol. 85, no. 24, pp. 5917–5919, 2004. 133
- [8] D. Pierreux, V. Machkaoutsan, E. Tois, J. Swerts, T. Schram, C. Adelmann, S. V. Elshocht, M. I. Popovici, T. Conard, J. Tseng, L.-A. ke Ragnarsson, and J. W. Maes, "Extreme Scaled Gate Dielectrics By Using ALD HfO<sub>2</sub>/SrTiO<sub>3</sub>

## Bibliographie

---

- Composite Structures,” *ECS Transactions*, vol. 25, no. 4, pp. 263–274, 2009. [134](#), [136](#)
- [9] T. Morooka, T. Matsuki, T. Nabatame, J. Yugami, K. Ikeda, and Y. Ohji, “Influence of Post Cap-layer Deposition Annealing Temperature on MgO Diffusion in High-k/IFL Stacks,” *International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM)*, 2009, pp. 128–129. [134](#)
- [10] J. Robertson, “High dielectric constant gate oxides for metal oxide Si transistors,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 69, no. 2, p. 327, 2006. [135](#), [149](#)
- [11] G. Tilloca, “Synthesis of ultrafine pure and yttria-stabilized hafnia by solid-state reaction at relatively low temperature,” *Journal of Materials Science*, vol. 30, pp. 1884–1889, 1995. [135](#)
- [12] P. R. Chalker, M. Werner, S. Romani, R. J. Potter, K. Black, H. C. Aspinall, A. C. Jones, C. Z. Zhao, S. Taylor, and P. N. Heys, “Permittivity enhancement of hafnium dioxide high-k films by cerium doping,” *Applied Physics Letters*, vol. 93, no. 18, p. 182911, 2008. [135](#)
- [13] V. Narayanan, V. K. Paruchuri, N. A. Bojarczuk, B. P. Linder, B. Doris, Y. H. Kim, S. Zafar, J. Stathis, S. Brown, J. Arnold, M. Copel, M. Steen, E. Cartier, A. Callegari, P. Jamison, J.-P. Locquet, D. L. Lacey, Y. Wang, P. E. Batson, P. Ronsheim, R. Jammy, M. P. Chudzik, M. Jeong, S. Guha, G. Shahidi, and T. C. Chen, “Band-Edge High-Performance High-k/Metal Gate n-MOSFETs Using Cap Layers Containing Group IIA and IIIB Elements with Gate-First Processing for 45 nm and Beyond,” *Proc. Digest of Technical Papers VLSI Technology Symp*, 2006, pp. 178–179. [137](#), [148](#)
- [14] M. Cassé, L. Brunet, and X. Garros, non publié. [137](#)
- [15] S. Toyoda, H. Kamada, T. Tanimura, H. Kumigashira, M. Oshima, T. Ohtsuka, Y. Hata, and M. Niwa, “Annealing effects of in-depth profile and band discontinuity in TiN/LaO/HfSiO/SiO<sub>2</sub>/Si gate stack structure studied by angle-resolved photoemission spectroscopy from backside,” *Applied Physics Letters*, vol. 96, no. 4, p. 042905, 2010. [147](#)
- [16] Y. Yamamoto, K. Kita, K. Kyuno, and A. Toriumi, “Structural and electrical properties of HfLaOx films for an amorphous high-k gate insulator,” *Applied Physics Letters*, vol. 89, no. 3, p. 032903, 2006. [147](#), [148](#)
- [17] —, “Study of La-Induced Flat Band Voltage Shift in Metal/HfLaOx/SiO<sub>2</sub>/Si Capacitors,” *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 46, no. 11, pp. 7251–7255, 2007. [147](#), [148](#)
- [18] P. D. Kirsch, P. Sivasubramani, J. Huang, C. D. Young, M. A. Quevedo-Lopez, H. C. Wen, H. Alshareef, K. Choi, C. S. Park, K. Freeman, M. M. Hussain, G. Bersuker, H. R. Harris, P. Majhi, R. Choi, P. Lysaght, B. H. Lee, H.-H.

- Tseng, R. Jammy, T. S. Boscke, D. J. Lichtenwalner, J. S. Jur, and A. I. Kingon, "Dipole model explaining high-k/metal gate field effect transistor threshold voltage tuning," *Applied Physics Letters*, vol. 92, no. 9, p. 092901, 2008. [147](#), [148](#), [153](#)
- [19] K. Kita and A. Toriumi, "Origin of electric dipoles formed at high-k/SiO<sub>2</sub> interface," *Applied Physics Letters*, vol. 94, no. 13, p. 132902, 2009. [147](#), [148](#)
- [20] C.-H. Liu, H.-W. Chen, S.-Y. Chen, H.-S. Huang, and L.-W. Cheng, "Current conduction of 0.72 nm equivalent-oxide-thickness LaO/HfO<sub>2</sub> stacked gate dielectrics," *Applied Physics Letters*, vol. 95, no. 1, p. 012103, 2009. [148](#)
- [21] T. Morooka, M. Sato, T. Matsuki, T. Suzuki, K. Shiraishi, A. Uedono, S. Miyazaki, K. Ohmori, K. Yamada, T. Nabatame, T. Chikyow, J. Yugami, K. Ikeda, and Y. Ohji, "Suppression of anomalous threshold voltage increase with area scaling for Mg- or La-incorporated high-k/Metal gate nMISFETs in deeply scaled region," *Proc. Symp. VLSI Technology (VLSIT)*, 2010, pp. 33–34. [148](#), [149](#)
- [22] P. Sivasubramani, T. S. Boscke, J. Huang, C. D. Young, P. D. Kirsch, S. A. Krishnan, M. A. Quevedo-Lopez, S. Govindarajan, B. S. Ju, H. R. Harris, D. J. Lichtenwalner, J. S. Jur, A. I. Kingon, J. Kim, B. E. Gnade, R. M. Wallace, G. Bersuker, B. H. Lee, and R. Jammy, "Dipole Moment Model Explaining nFET V<sub>t</sub> Tuning Utilizing La, Sc, Er, and Sr Doped HfSiON Dielectrics," *Proc. IEEE Symp. VLSI Technology*, 2007, pp. 68–69. [148](#)
- [23] M. Charbonnier, "Étude du travail de sortie dans les transistors High-k à grille Métallique," Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2010. [153](#)





# Modélisation d'interfaces non-abruptes

---

Tout au long de ce manuscrit, nous avons considéré des transitions abruptes entre les différents matériaux composant l'empilement de grille. Cette approche présente l'avantage de limiter le nombre de paramètres d'ajustement et d'être l'approche la plus couramment utilisée par la communauté scientifique.

Des résultats de simulations atomistiques [1, 2] ou expérimentales [3, 4] ont toutefois montré que la transition stœchiométrique aux interfaces Silicium - IL, IL - high- $\kappa$  et high- $\kappa$  - métal s'étend sur quelques angströms. Dans l'approche développée jusqu'à présent, ces zones de transitions ont été négligées, que ce soit dans la modélisation de la caractéristique  $C(V_g)$  (simulation Poisson-Schrödinger) ou la modélisation du courant tunnel. Les interfaces entre les matériaux ont été considérées abruptes, et, en conséquence, la dépendance spatiale des principaux paramètres (permittivité, masses tunnel des porteurs et énergie potentielle) présentait des discontinuités. Toutefois, cette approche a permis de modéliser les caractéristiques électriques expérimentales d'empilements  $\text{HfO}_2$ , et de comparer nos résultats d'extraction avec la littérature. Ce formalisme est en effet celui retenu par une grande majorité de la communauté scientifique, les études intégrant des zones graduelles aux interfaces restant marginales.

Dans les empilements high- $\kappa$  étudiés dans le cadre de cette thèse, les épaisseurs physiques des diélectriques de grille IL et high- $\kappa$  sont ultra-minces et susceptibles d'être du même ordre de grandeur que les zones de transition : remettre en question l'hypothèse d'interfaces abruptes apparaît légitime.

Dans ce chapitre, nous nous proposons d'intégrer des zones graduelles dans la simulation Poisson-Schrödinger et la modélisation du courant tunnel d'empilements  $\text{SiO}_2$  -  $\text{HfO}_2$  - TiN et de juger de leur impact sur les caractéristiques électriques simulées.

La première partie présente le modèle retenu pour rendre compte des interfaces graduelles, en se basant sur les résultats de simulation atomistique de Markov et al. [1]. La deuxième partie se concentre sur les effets d'une interface Silicium - IL non-abrupte sur le confinement quantique (approche Poisson-Schrödinger), et donc sur le darkspace et l'extraction d'EOT dans une approche expérimentale. Enfin, une troisième et dernière partie mesure l'influence des interfaces graduelles Silicium -  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{SiO}_2$  -  $\text{HfO}_2$  et  $\text{HfO}_2$  - TiN sur la simulation du courant tunnel en régime d'inversion nMOS.



## 1 Modélisation des interfaces graduelles

Dans ce chapitre, nous nous concentrons sur les interfaces d'empilements nMOS  $\text{SiO}_2$  -  $\text{HfO}_2$  -  $\text{TiN}$  (voir Figure 5.1), à savoir :

- la transition Silicium -  $\text{SiO}_2$ , notée **a** et d'épaisseur  $t_a$ ,
- la transition  $\text{SiO}_2$  -  $\text{HfO}_2$ , notée **b** et d'épaisseur  $t_b$ ,
- la transition  $\text{HfO}_2$  -  $\text{TiN}$ , notée **c** et d'épaisseur  $t_c$ .

Les épaisseurs  $t_{\text{SiO}_2}$  et  $t_{\text{HfO}_2}$  désignent les parts de diélectrique non impactées par les zones de transition. L'épaisseur totale de l'empilement est donc donnée par  $t_{\text{phys}} = t_a + t_{\text{SiO}_2} + t_b + t_{\text{HfO}_2} + t_c$ .

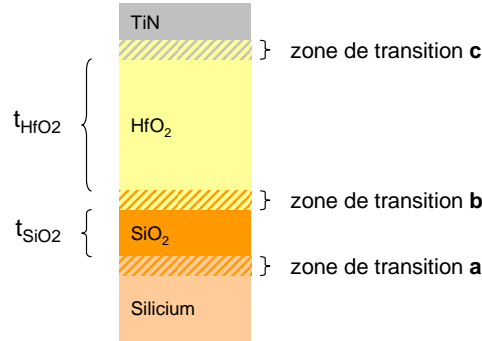


FIGURE 5.1 – Représentation schématique d'un empilement  $\text{SiO}_2$  -  $\text{HfO}_2$  -  $\text{TiN}$  avec interfaces graduelles.

La nature chimique exacte des interfaces d'un empilement high- $\kappa$  est mal connue. Les différentes méthodes permettant de les caractériser montrent en effet certaines limites :

- Des méthodes d'analyse physico-chimique de type TEM, EELS, AR-XPS ou MEIS montrent que les concentrations d'éléments chimiques Si, O, Hf, Ti et N dans un empilement ne présentent pas de discontinuité aux interfaces et diffusent dans les matériaux proches voisins [4, 5, 6, 7]. Toutefois, ces moyens de caractérisation peinent à identifier les paramètres des nouveaux matériaux formés à ces interfaces (silicate  $\text{HfSiO}$  à l'interface  $\text{SiO}_2$  -  $\text{HfO}_2$  par exemple). De plus, la présence d'artefacts de mesure n'est pas à exclure. Ces méthodes permettent donc de juger qualitativement de la qualité d'une interface, mais une analyse poussée et quantitative demeure difficile.
- Des résultats de simulation ab-initio confirment une transition graduelle de l'énergie potentielle entre le Silicium et l'IL [1, 2]. Ce type d'approche permet certes de juger des effets théoriques liés à la sous-stœchiométrie de la transition entre 2 matériaux, mais, comme pour toute étude théorique, les résultats quantitatifs proposés restent à confirmer expérimentalement.

## 1. Modélisation des interfaces graduelles

Pour prendre en compte ce phénomène, nous faisons l'approximation d'une variation linéaire des paramètres des matériaux dans les zones de transition : les valeurs d'énergie potentielle, de permittivité et de masse tunnel évoluent donc entre les paramètres intrinsèques des matériaux proches voisins. Cette hypothèse se base sur les résultats de simulation ab-initio de Markov et al. [1] et est schématisée en Figure 5.2. Bien que simplificatrice, nous attendons qu'elle permette de mesurer l'impact d'une description réaliste des propriétés des interfaces sur les résultats de simulation.

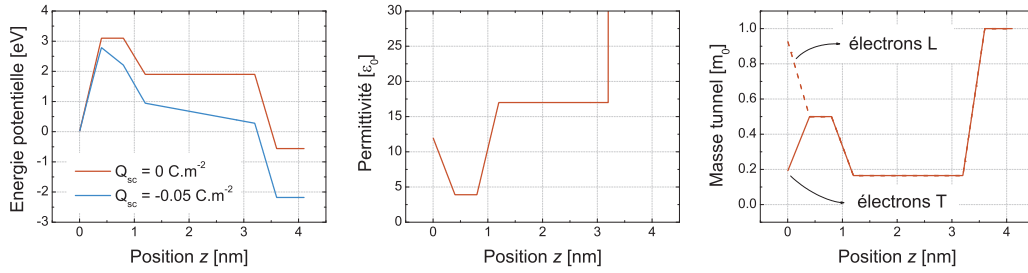


FIGURE 5.2 – Evolution de l'énergie potentielle, la permittivité et la masse tunnel parabolique des électrons dans un empilement  $\text{SiO}_2$  -  $\text{HfO}_2$  -  $\text{TiN}$  de paramètres  $t_a = 0,4 \text{ nm}$ ,  $t_{\text{SiO}_2} = 0,5 \text{ nm}$ ,  $t_b = 0,4 \text{ nm}$ ,  $t_{\text{HfO}_2} = 2 \text{ nm}$  et  $t_c = 0,4 \text{ nm}$ .

Dans ce chapitre, les paramètres de volume des matériaux  $\text{SiO}_2$  et  $\text{HfO}_2$  (permittivité et masse tunnel) seront considérés égaux à ceux définis au cours de l'analyse électrique présentée dans le chapitre 3. Ces paramètres sont également donnés dans la première colonne du Tableau 4.2, page 141.

## 2 Impact sur le confinement et l'extraction d'EOT

En régime d'inversion nMOS, la forte courbure de bandes dans le Silicium d'une part et l'interface abrupte Si - SiO<sub>2</sub> d'autre part induisent un puits de potentiel et confinent les électrons. La prise en compte d'une transition linéaire de l'énergie potentielle, de la permittivité et de la masse tunnel à cette interface tend à élargir le puits de potentiel et une modification de l'effet de confinement est attendue.

Le Tableau 5.1 décrit les caractéristiques de 2 empilements simulés, suivant une approche abrupte ou graduelle pour l'interface Si - SiO<sub>2</sub>. La zone de transition **a** a une épaisseur  $t_a = 0,3 \text{ nm}$  [1] et nous faisons le choix de considérer les 2 autres interfaces comme abruptes, leur description n'intervenant pas dans la simulation du confinement ( $t_b = t_c = 0$ ). De plus, les 2 empilements simulés présentent un EOT identique pour permettre une comparaison à champ constant. Pour tenir compte de la transition linéaire de permittivité dans la zone graduelle, l'EOT de l'empilement est calculé suivant la formule générale :

$$\text{EOT} = \varepsilon_{\text{SiO}_2} \int_0^{t_{\text{phys}}} 1/\varepsilon(z) dz \quad (5.1)$$

Description	Abrupte	Graduelle
$t_a$	0Å	3Å
$t_{\text{SiO}_2}$	9Å	7,4Å
$t_{\text{HfO}_2}$	30Å	30Å
EOT	1,55nm	1,55nm
$t_{\text{phys}}$	3,9nm	4,04nm

TABLEAU 5.1 – Caractéristiques des empilements simulés présentant une interface Si - SiO<sub>2</sub> abrupte ou graduelle.

La Figure 5.3 représente les fonctions d'onde des niveaux fondamentaux des électrons L et T confinés dans la bande de conduction en fonction de la description de l'interface. Considérer une zone de transition des paramètres à l'interface induit un décalage de la densité de porteurs : la pénétration des fonctions d'onde apparaît donc plus importante dans l'empilement graduel (en considérant une référence spatiale commune en  $z = 0$ ), en raison d'une barrière de potentiel plus faible.

Cette plus grande pénétration de la charge dans l'empilement induit une diminution du darkspace, comme observé sur les relations  $C(V_g)$  simulées des empilements. La Figure 5.4 montre notamment un écart de 0,5Å sur l'évaluation du CET, confirmé par la position des niveaux confinés L0, T0, L1 et T1 (Figure 5.5) : modéliser une interface graduelle revenant à étendre spatialement le puits de potentiel, la charge confinée à l'interface possède alors une énergie moyenne plus faible.

Dans une approche expérimentale, la relation  $C(V_g)$  théorique est comparée à une caractéristique mesurée. En fonction de l'hypothèse retenue pour la description de l'interface **a**, 2 cas peuvent donc être distingués :

## 2. Impact sur le confinement et l'extraction d'EOT

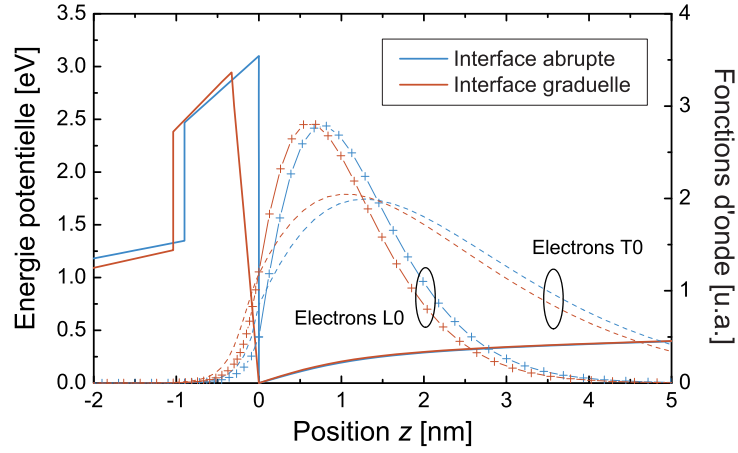


FIGURE 5.3 – Fonctions d’onde des niveaux fondamentaux L0 et T0 en condition d’inversion nMOS ( $V_g = 2$  V) dans les empilements abrupt et graduel (dopage Na =  $2.10^{23} \text{ m}^{-3}$ ).

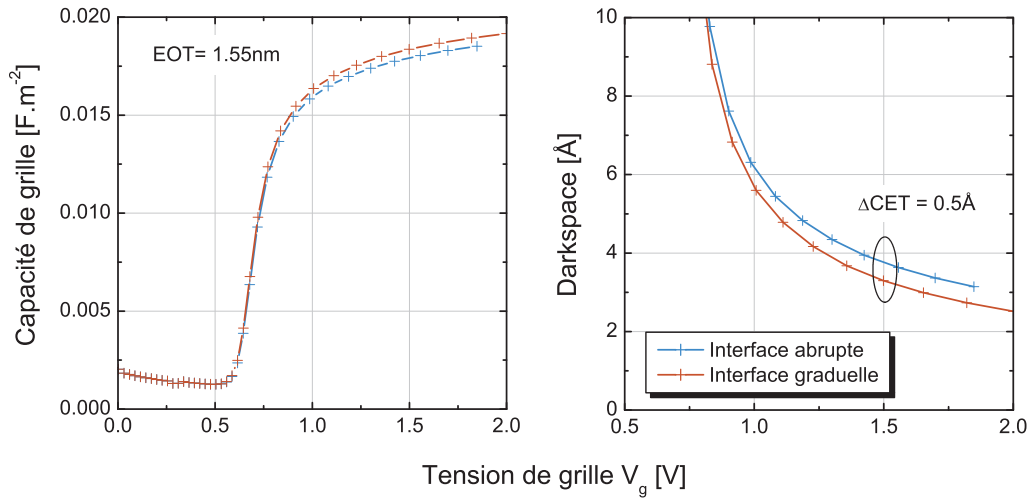


FIGURE 5.4 – Caractéristiques  $C(V_g)$  simulées des empilements abrupt et graduel et évolution du darkspace en fonction de la tension de grille  $V_g$ .

1. La caractéristique  $C(V_g)$  expérimentale est comparée à la simulation Poisson-Schrödinger conventionnelle, c’est-à-dire sans prendre en compte un gradient de paramètres à l’interface Si -  $\text{SiO}_2$ . Dans ce cas, une valeur d’EOT  $\text{EOT}_{\text{abr}}$  est obtenue, caractéristique d’une interface abrupte.
2. Intégrer une zone de transition  $t_a = 3 \text{ Å}$  entraîne l’extraction d’une valeur d’EOT plus importante de  $0,5 \text{ Å}$  :  $\text{EOT}_{\text{grad}} = \text{EOT}_{\text{abr}} + 0,5 \text{ Å}$ . Cette valeur,

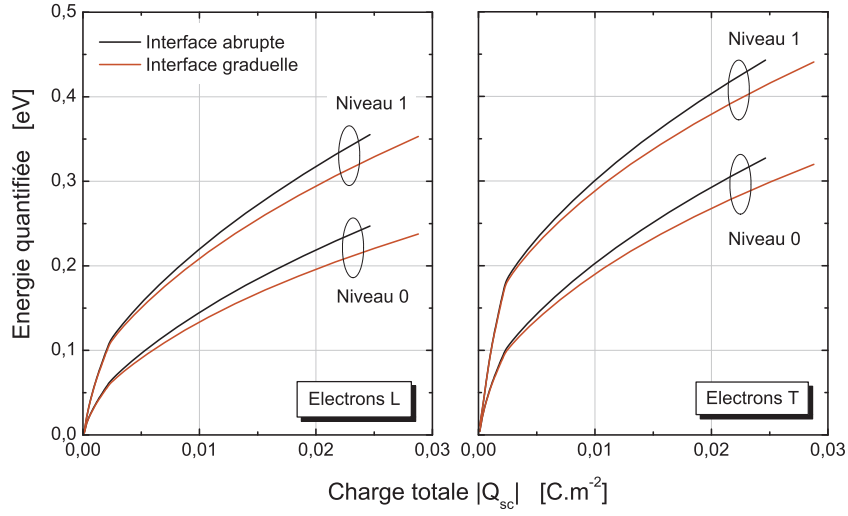


FIGURE 5.5 – Evolution des niveaux énergétiques confinés L0, T0, L1 et T1 des empilements **F** et **G**.

bien que différente du premier cas, n'en est pas pour autant plus exacte ou plus précise : elle est simplement caractéristique de la description graduelle de l'interface **a**.

Dans chacun de ces cas, conjuguer la valeur d'EOT extraite avec l'hypothèse retenue pour la description de l'interface **a** permet d'estimer le profil d'énergie potentielle de l'empilement. A partir des données supposées connues  $t_{\text{HfO}_2}$ ,  $\varepsilon_{\text{HfO}_2}$  et  $\varepsilon_{\text{SiO}_2}$  (exemple du cas expérimental du chapitre 3), nous obtenons les 2 profils représentés en Figure 5.6 (condition de bandes plates). Il apparaît que les 2 empilements de même caractéristique  $C(V_g)$  présentent une énergie potentielle moyenne équivalente dans la zone qui nous intéresse. Dans une approche expérimentale visant à extraire l'EOT d'un empilement, il est donc raisonnable d'approximer la transition entre le Silicium et l'IL par une interface abrupte "moyenne".

L'évolution conjointe de l'effet de confinement et du profil d'énergie potentielle de l'empilement que nous avons observé est également susceptible d'influencer les résultats de simulation de courant tunnel. L'impact des zones graduelles sur le courant de grille fait l'objet du prochain paragraphe.

## 2. Impact sur le confinement et l'extraction d'EOT

---

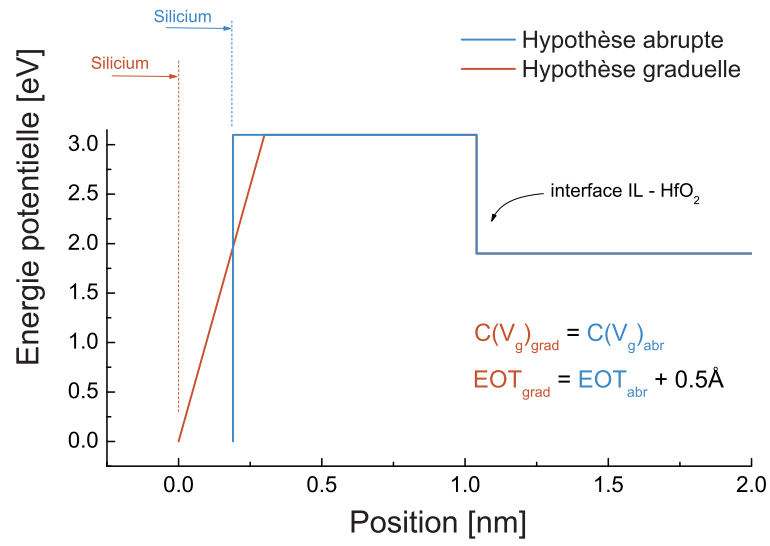


FIGURE 5.6 – Profils d'énergie potentielle extraits à partir d'une même caractéristique  $C(V_g)$  expérimentale avec les hypothèses  $t_a = 0\text{\AA}$  (traits bleus) et  $t_a = 3\text{\AA}$  (traits rouges).

### 3 Impact sur la simulation du courant tunnel

La présence de zones de transition aux interfaces **a**, **b** et **c** modifie le profil d'énergie potentielle de l'empilement, et une évolution de la conduction tunnel est attendue. Dans ce paragraphe, nous traitons séparément l'influence de chaque épaisseur  $t_a$ ,  $t_b$  et  $t_c$  sur la modélisation du courant tunnel 2D d'électrons (régime d'inversion nMOS). De plus, pour mesurer l'impact de cette description sur l'extraction des paramètres tunnel dans une approche expérimentale, les épaisseurs physiques  $t_{\text{SiO}_2}$  et  $t_{\text{HfO}_2}$  seront ajustées pour conserver une valeur d'EOT constante.

#### 3.1 Interface a : Silicium - SiO<sub>2</sub>

Nous considérons dans un premier temps un empilement SiO<sub>2</sub> - HfO<sub>2</sub> - TiN présentant les paramètres suivants :

- épaisseur  $t_{\text{HfO}_2} = 2 \text{ nm}$ ,
- interfaces **b** et **c** abruptes ( $t_b = t_c = 0 \text{ \AA}$ ),
- zone de transition **a** d'épaisseur variable,
- EOT variable et correspondant à la valeur extraire par mesure  $C(V_g)$  (on définit  $\text{EOT} = 1,5 \text{ nm}$  pour  $t_a = 0 \text{ \AA}$ , et donc par exemple  $\text{EOT} = 1,5 \text{ nm} - 0,05 \text{ nm}$  pour  $t_a = 3 \text{ \AA}$ ),
- épaisseur  $t_{\text{SiO}_2}$  variable, ajustée en fonction de  $t_a$  pour garantir la valeur d'EOT choisie.

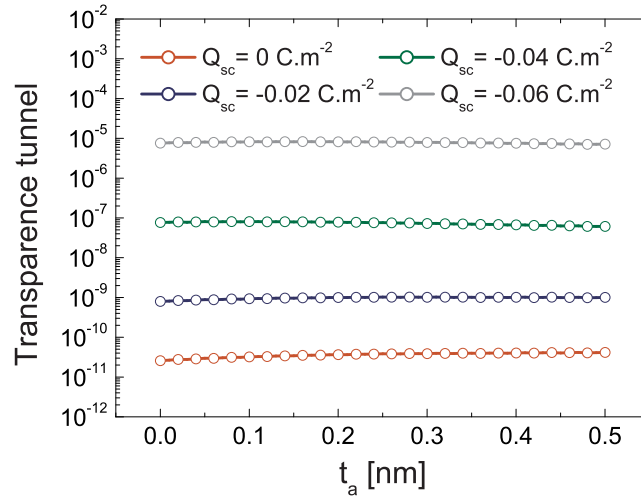


FIGURE 5.7 – Transparence tunnel d'empilements SiO<sub>2</sub> - HfO<sub>2</sub> - TiN présentant différentes épaisseurs  $t_a$ . L'énergie des électrons incidents est égale à 100meV (référence d'énergie : bande de conduction du Silicium).

La Figure 5.7 montre l'évolution de la transparence tunnel de l'empilement en fonction de l'épaisseur de zone de transition  $t_a$  retenue. Pour différentes valeurs

### 3. Impact sur la simulation du courant tunnel

de champ électrique dans l'empilement, la transparence tunnel apparaît constante quelle que soit l'épaisseur  $t_a$  considérée. Ces résultats de simulation montrent que modéliser une interface graduelle entre le Silicium et le  $\text{SiO}_2$  n'apporte aucune avancée significative par rapport à une approche conventionnelle (interface abrupte).

Néanmoins, Markov et al. ont montré que modéliser une interface Si -  $\text{SiO}_2$  graduelle conduisait à accroître le courant tunnel simulé [1]. Dans leur approche, les hypothèses “interface abrupte” et “interface graduelle” sont comparées à épaisseur physique totale constante, et non à EOT constant comme dans notre cas. Ils soulignent notamment que la zone de transition **a** présente une transparence plus importante qu'une couche  $\text{SiO}_2$  de même épaisseur. Dans notre approche, la transparence de la zone **a** est compensée par une épaisseur  $t_{\text{SiO}_2}$  plus importante (conservation de l'EOT).

La Figure 5.8 montre les résultats de simulation tunnel<sup>1</sup> dans 3 empilements  $\text{SiO}_2$  -  $\text{HfO}_2$  - TiN distincts :

- nous comparons dans un premier temps 2 empilements abrupt et graduel, présentant une même caractéristique  $C(V_g)$  mais une épaisseur  $t_{\text{phys}}$  différente,
- dans un deuxième temps l'empilement abrupt ( $t_a = 0\text{\AA}$  et  $t_{\text{SiO}_2} = 9\text{\AA}$ ) est comparé à l'approche de Markov et al. (interface graduelle et même épaisseur physique de l'empilement, soit  $t_a = 3\text{\AA}$  et  $t_{\text{SiO}_2} = 6\text{\AA}$ ).

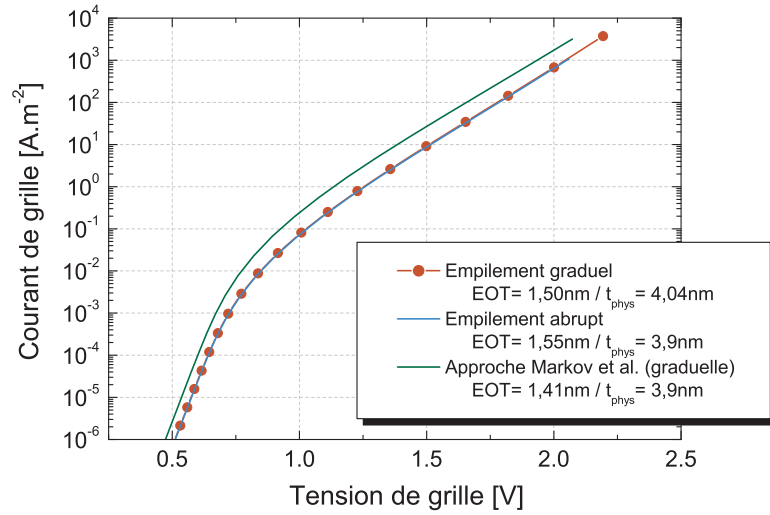


FIGURE 5.8 – Simulation du courant de grille dans 3 empilements  $\text{SiO}_2$  -  $\text{HfO}_2$  - TiN. La prise en compte d'une interface **a** graduelle est comparée suivant 2 approches : caractéristique  $C(V_g)$  constante ou épaisseur physique constante.

1. A noter que le modèle tunnel utilisé intègre l'influence de la zone de transition à la fois sur le confinement (voir paragraphe précédent) et sur la transparence tunnel.



Ces résultats de simulation confirment les conclusions de Markov et al. : une zone graduelle à l'interface **a** présente une transparence supérieure à une épaisseur équivalente de SiO<sub>2</sub> et conduit, dans une approche où  $t_{\text{phys}}$  est gardée constante, à un courant de grille plus important. Néanmoins, dans une approche expérimentale où l'EOT est un paramètre d'entrée de la simulation, considérer ou non une interface **a** graduelle n'a pas d'impact sur la simulation de courant.

Nous concluons donc que considérer une interface Silicium - SiO<sub>2</sub> abrupte est une approximation valide pour analyser la conduction dans un empilement high- $\kappa$ . Intégrer une modélisation plus réaliste de cette interface ne modifie ni l'extraction des épaisseurs physiques (voir paragraphe précédent), ni l'extraction des paramètres tunnel.

### 3.2 Interface **c** : HfO<sub>2</sub> - métal TiN

Pour mesurer l'influence d'une zone de transition  $t_c$  à l'interface HfO<sub>2</sub> - TiN, une approche de simulation identique au paragraphe précédent est employée, appliquée à l'interface **c**. Nous considérons donc des empilements présentant les paramètres suivants :

- épaisseur  $t_{\text{SiO}_2} = 1 \text{ nm}$ ,
- interfaces **a** et **b** abruptes ( $t_a = t_b = 0 \text{ \AA}$ ),
- EOT = 1,5 nm,
- zone de transition **c** d'épaisseur variable,
- épaisseur  $t_{\text{HfO}_2}$  variable, ajustée en fonction de  $t_c$  pour conserver une valeur constante d'EOT.

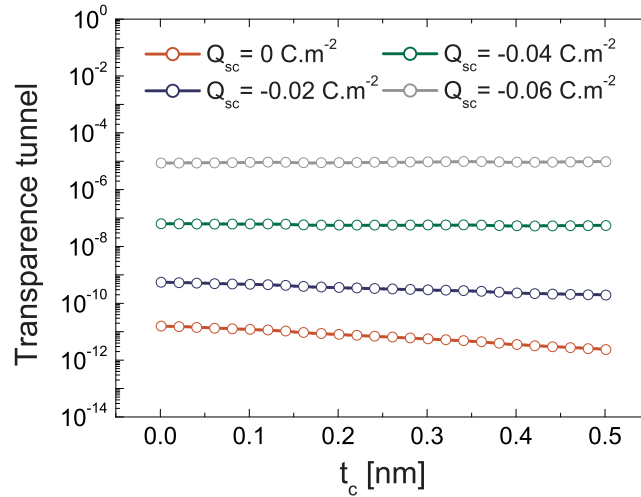


FIGURE 5.9 – Transparence tunnel d'empilements SiO<sub>2</sub> - HfO<sub>2</sub> - TiN présentant différentes épaisseurs  $t_c$ . L'EOT est constant (= 1,5 nm) et l'énergie des électrons incidents est égale à 100meV.

### 3. Impact sur la simulation du courant tunnel

L'évolution de la transparence tunnel en fonction de l'épaisseur de zone de transition  $t_c$  (Figure 5.9) montre un comportement différent selon que l'empilement est en condition de bandes plates ( $Q_{sc} = 0 \text{ C.m}^{-2}$ ) ou soumis à un fort champ électrique ( $Q_{sc} < -0,02 \text{ C.m}^{-2}$ ).

Cette tendance s'explique par l'approche retenue pour la modélisation de l'interface graduelle. Pour  $t_c = 0 \text{ \AA}$ , une épaisseur  $t_{\text{HfO}_2} = 2,18 \text{ nm}$  est calculée pour garantir un EOT de  $1,5 \text{ nm}$ . Dans notre approche, la permittivité du métal de grille est considérée infinie, ce qui conduit à une permittivité de zone de transition également infinie. Cette zone présente donc un EOT nul, et l'épaisseur de  $\text{HfO}_2$  "pur" reste inchangée quelle que soit l'épaisseur  $t_c$  considérée. L'interface graduelle présente néanmoins une certaine épaisseur, ce qui explique la baisse de la transparence tunnel à EOT constant entre les hypothèses  $t_c = 0 \text{ \AA}$  et  $t_c = 5 \text{ \AA}$ . A fort champ, le mécanisme tunnel est de type Fowler-Nordheim (voir Figure 5.10) et la zone de transition n'a plus d'impact sur le courant de grille : cette observation explique la constance de la transparence tunnel en fonction de  $t_c$  dès lors que  $Q_{sc} < -0,02 \text{ C.m}^{-2}$ .

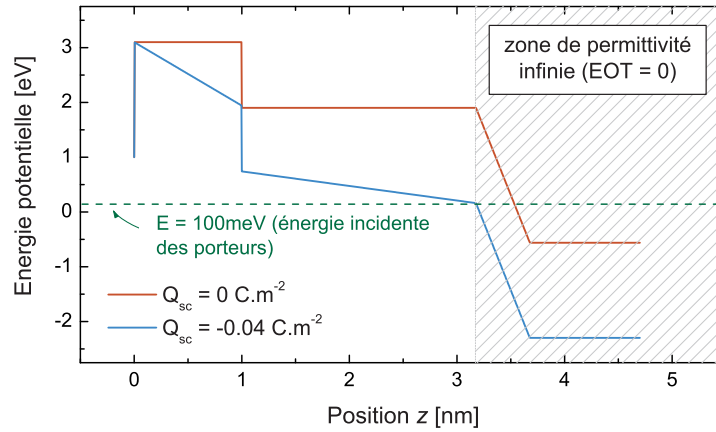


FIGURE 5.10 – Profils d'énergie potentielle d'un empilement présentant une zone de transition  $t_c = 5 \text{ \AA}$  en condition de bandes plates ( $Q_{sc} = 0 \text{ C.m}^{-2}$ ) et à fort champ ( $Q_{sc} = -0,04 \text{ C.m}^{-2}$ ).

Pour cette raison, la prise en compte d'une interface graduelle à l'interface  $\text{HfO}_2$  - métal TiN n'apparaît pas nécessaire pour toute étude expérimentale de la conduction électrique.

### 3.3 Interface b : $\text{SiO}_2$ - $\text{HfO}_2$

Nous considérons dans cette partie des empilements présentant les paramètres suivants :

- zone de transition **b** d'épaisseur variable,
- interfaces **a** et **c** abruptes ( $t_a = t_c = 0 \text{ \AA}$ ),

- épaisseur  $t_{\text{SiO}_2} = 1 \text{ nm} - t_b/2$  pour tenir compte d'une zone de transition s'étendant à la fois dans le  $\text{SiO}_2$  et le  $\text{HfO}_2$ ,
- $\text{EOT} = 1,5 \text{ nm}$ ,
- épaisseur  $t_{\text{HfO}_2}$  variable, ajustée en fonction de  $t_b$  pour conserver une valeur constante d'EOT.

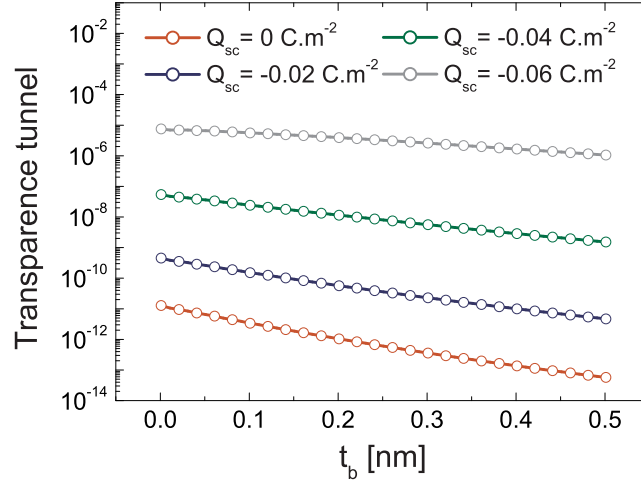


FIGURE 5.11 – Transparence tunnel d'empilements  $\text{SiO}_2$  -  $\text{HfO}_2$  -  $\text{TiN}$  présentant différentes épaisseurs  $t_b$ . L'EOT est constant ( $= 1,5 \text{ nm}$ ) et l'énergie des électrons incidents est égale à  $100 \text{ meV}$ .

Contrairement aux interfaces précédemment étudiées, considérer une interface **b** graduelle impacte considérablement la transparence tunnel de l'empilement. La Figure 5.11 montre en effet une baisse de plusieurs décades de la transparence entre l'hypothèse d'une interface abrupte et la prise en compte d'une zone de transition  $t_b = 5 \text{ \AA}$ . Cette baisse de la transparence est due à une augmentation de l'épaisseur physique totale pour compenser 1/ la diminution de  $t_{\text{SiO}_2}$  quand  $t_b$  augmente et 2/ la diminution d'EOT engendrée par la zone de transition de permittivité plus élevée que  $\epsilon_{\text{SiO}_2}$ . Cette diminution de la transparence tunnel induit une diminution du courant tunnel, comme représenté en Figure 5.12.

En pratique, la simulation tunnel est comparée à l'expérience pour extraire les paramètres tunnel de l'empilement, et plus particulièrement les paramètres du high- $\kappa$ . La diminution du courant tunnel observée induit donc une extraction de paramètres qui est fonction de l'épaisseur de zone de transition retenue dans la simulation. La Figure 5.13 montre l'exemple d'une approche expérimentale conventionnelle dans laquelle les paramètres tunnel du high- $\kappa$  (masse tunnel des électrons  $m_{\text{HfO}_2}$  et hauteur de barrière  $\phi_{\text{HfO}_2}$ ) sont les seules inconnues. Ces résultats de simulation montrent une diminution importante des valeurs extraites quand l'épaisseur  $t_b$  augmente. Des grandeurs  $m_{\text{HfO}_2}$  et  $\phi_{\text{HfO}_2}$  plus faibles permettent en effet de compenser la diminution de courant observée quand l'épaisseur  $t_b$  simulée est importante.

### 3. Impact sur la simulation du courant tunnel

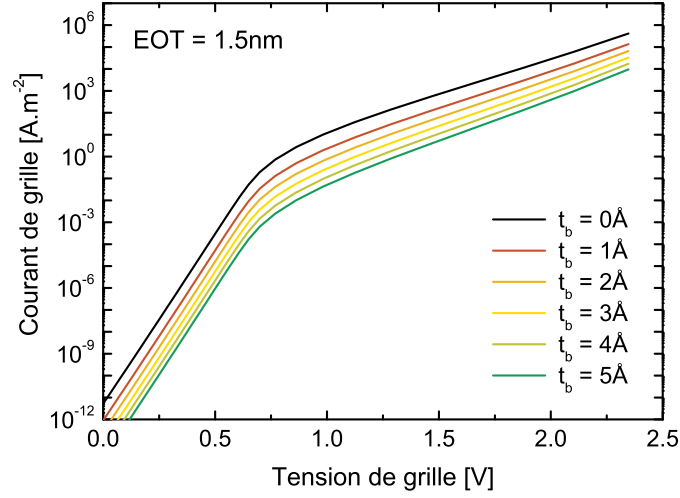


FIGURE 5.12 – Caractéristiques  $I_g(V_g)$  simulées d'empilements de grille SiO<sub>2</sub> - HfO<sub>2</sub> - TiN présentant différentes épaisseurs de zone de transition SiO<sub>2</sub> - HfO<sub>2</sub>. L'EOT est constant et égal à 1,5 nm.

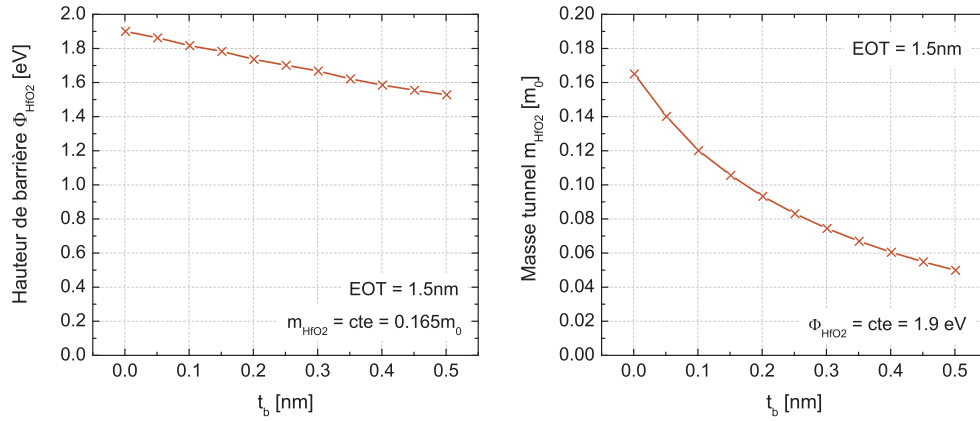


FIGURE 5.13 – Paramètres tunnel  $m_{\text{HfO}_2}$  et  $\phi_{\text{HfO}_2}$  extraits en fonction de l'épaisseur  $t_b$  retenue dans la simulation tunnel dans une approche expérimentale conventionnelle.

Pour conclure, il apparaît que la modélisation de l'interface SiO<sub>2</sub> - HfO<sub>2</sub> est un point critique pour l'extraction précise des paramètres tunnel de l'empilement. Une mauvaise connaissance de la transition des matériaux à cette interface est en effet susceptible de fausser considérablement l'extraction de paramètres. Néanmoins, la connaissance conjointe de l'épaisseur de HfO<sub>2</sub> (bonne maîtrise du dépôt, exemple de

l'ALD) et de l'épaisseur physique totale (observation TEM par exemple) permet de limiter les erreurs d'appréciation : les fortes différences observées précédemment dans l'extraction de paramètres sont en effet caractéristiques de variations d'épaisseur physique totale (inhérentes à la conservation d'EOT). L'étude proposée dans le chapitre 3 est donc certes susceptibles de proposer des ensembles de paramètres propres à une approximation abrupte des interfaces, mais les observations physico-chimiques alors réalisées permettent d'exclure toute erreur significative.

## 4 Conclusions du Chapitre 5

Dans ce chapitre, nous avons étudié l'impact d'une description graduelle des interfaces d'un empilement  $\text{SiO}_2 - \text{HfO}_2 - \text{TiN}$  sur la simulation électrique de ce type d'empilement d'une part, et sur l'extraction de paramètres d'autre part (EOT, paramètres tunnel notamment). Cette démarche s'appuie sur un ensemble de résultats théoriques ou expérimentaux publiés dans la littérature qui soulignent le caractère non-abrupt de ces interfaces

Il apparaît qu'une modélisation graduelle des interfaces Silicium -  $\text{SiO}_2$  et  $\text{HfO}_2 - \text{TiN}$  n'apporte aucune avancée significative dans la simulation des caractéristiques  $C(V_g)$  et  $I_g(V_g)$  d'un empilement, ni dans l'extraction de l'EOT et des paramètres tunnel. En effet, les conclusions expérimentales restent identiques quelle que soit l'approche retenue pour décrire ces interfaces.

De même, la prise en compte d'une interface graduelle entre les matériaux  $\text{SiO}_2$  et  $\text{HfO}_2$  n'affecte pas la valeur extraite d'EOT. Elle influe toutefois considérablement la conduction électrique dans l'empilement et affecte significativement les résultats de simulation tunnel. Dans une approche expérimentale pour laquelle l'EOT est un paramètre d'entrée de la simulation, nous avons mis en évidence une diminution du courant tunnel simulé en augmentant l'épaisseur de la zone de transition. Nous soulignons donc que les paramètres tunnel du high- $\kappa$  extraits dans toute approche expérimentale sont dépendants de la description retenue pour l'interface  $\text{SiO}_2 - \text{HfO}_2$ .

## Bibliographie

- [1] S. Markov, P. V. Sushko, S. Roy, C. Fiegna, E. Sangiorgi, A. L. Shluger, and A. Asenov, “Si-SiO<sub>2</sub> Interface Band-gap Transition Effects on MOS Inversion Layer,” *Physica Status Solidi (a)*, vol. 205, pp. 1290–1295, 2008. [163](#), [164](#), [165](#), [166](#), [171](#)
- [2] P. Broqvist and A. Pasquarello, “Band gaps and dielectric constants of amorphous hafnium silicates : A first-principles investigation,” *Applied Physics Letters*, vol. 90, no. 8, p. 082907, 2007. [163](#), [164](#)
- [3] T. Hattori, K. Takahashi, M. B. Seman, H. Nohira, K. Hirose, N. Kamakura, Y. Takata, S. Shin, and K. Kobayashi, “Chemical and Electronic Structure of SiO<sub>2</sub>/Si Interfacial Transition Layer,” *Applied Surface Science*, vol. 212-213, pp. 547 – 555, 2003. [163](#)
- [4] M. P. Agustin, L. R. C. Fonseca, J. C. Hooker, and S. Stemmer, “Scanning transmission electron microscopy of gate stacks with HfO<sub>2</sub> dielectrics and TiN electrodes,” *Applied Physics Letters*, vol. 87, no. 12, p. 121909, 2005. [163](#), [164](#)
- [5] H. D. B. Gottlob, A. Stefani, M. Schmidt, M. C. Lemme, H. Kurz, I. Z. Mitrovic, M. Werner, W. M. Davey, S. Hall, P. R. Chalker, K. Cherkaoui, P. K. Hurley, J. Piscator, O. Engstrom, and S. B. Newcomb, “Gd silicate : A high-k dielectric compatible with high temperature annealing,” *Journal of Vacuum Science & Technology B : Microelectronics and Nanometer Structures*, vol. 27, no. 1, pp. 249–252, 2009. [164](#)
- [6] H. Zhao, J. Huang, Y.-T. Chen, J. H. Yum, Y. Wang, F. Zhou, F. Xue, and J. C. Lee, “Effects of gate-first and gate-last process on interface quality of In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As metal-oxide-semiconductor capacitors using atomic-layer-deposited Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and HfO<sub>2</sub> oxides,” *Applied Physics Letters*, vol. 95, no. 25, p. 253501, 2009. [164](#)
- [7] C. Gaumer, “Caractérisation Physico-Chimique Front-End : Canal - Diélectrique - Métal,” Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2010. [164](#)







# Conclusion générale

---

Ce mémoire de thèse présente une étude approfondie de la conduction électrique dans un empilement MOS intégrant un diélectrique high- $\kappa$  en tant qu'oxyde de grille. L'introduction de ces nouveaux matériaux, requise dès le nœud 45nm haute-performance, permet de limiter le courant de grille tout en assurant un bon couplage électrostatique entre la grille et le canal de conduction. Bien qu'avéré expérimentalement, ce bénéfice reste toutefois difficile à expliquer uniquement par l'augmentation de l'épaisseur physique de la couche diélectrique. Les défis à relever pour quantifier précisément les niveaux de courant sont nombreux, et, au commencement de cette thèse, la littérature ne présentait aucune étude expérimentale complète permettant de conclure sur la nature des mécanismes de conduction dans un empilement high- $\kappa$  et les paramètres tunnel des matériaux diélectriques. Ce manuscrit s'articule autour de deux axes majeurs :

- le développement d'un modèle physique de courant tunnel, adapté à l'étude du transport dans un bi-couche IL - high- $\kappa$  et prenant en compte les effets quantiques inhérents à l'épaisseur ultra-mince des couches étudiées,
- une étude expérimentale exhaustive, reposant sur un échantillon complet d'empilements IL - HfO<sub>2</sub> et l'utilisation de moyens de caractérisation avancés.

Le Chapitre 2 présente l'effet de confinement quantique à l'interface du substrat Silicium. Ce phénomène quantique est à l'origine du darkspace, zone désertée de charge à l'interface conduisant à augmenter l'épaisseur équivalente électrique de l'empilement de 3-4Å. Modéliser le confinement en résolvant conjointement les équations de Poisson et Schrödinger s'est donc avéré être une étape indispensable dans notre étude, que ce soit pour une extraction précise de l'EOT à partir des caractéristiques  $C(V_g)$  expérimentales, ou pour une description de la charge confinée susceptible de transister dans l'empilement.

Ce chapitre met en évidence la nécessaire prise en compte de la pénétration des fonctions d'onde des trous et des électrons dans l'empilement diélectrique. Intégrer l'effet tunnel dans la simulation Poisson-Schrödinger induit en effet un décalage du barycentre de charge vers l'interface du Silicium, et permet de s'affranchir d'une erreur de 1Å dans l'évaluation de l'EOT (soit une erreur comprise en 10 et 20% pour un empilement de grille des nœuds 32nm et en-deçà). De plus, nous avons observé que le décalage du barycentre de charge est surtout sensible aux paramètres tunnel de l'oxyde d'interface SiO<sub>2</sub>, la part évanescence de la charge ne s'étendant que 5-6Å au-delà de l'interface du Silicium. Les paramètres tunnel du diélectrique high- $\kappa$ , plus faibles et favorisant la pénétration des fonctions d'onde, ne joueront donc un rôle uniquement pour des oxydes d'interface présentant des épaisseurs inférieures à 6Å.

Nous proposons également une description avancée de la bande de valence, basée sur des résultats de simulation  $k \cdot p$   $6 \times 6$ . Si ce type d'approche s'avère nécessaire pour modéliser le courant de drain en inversion pMOS, nous avons établi qu'elle n'apportait aucune avancée majeure pour l'extraction d'EOT par rapport à une simple description parabolique.

Enfin, la simulation Poisson-Schrödinger a permis de modéliser les caractéristiques  $C(V_g)$  expérimentales de différentes capacités nMOS et pMOS, et ce pour une plage étendue de valeurs de dopage substrat et des valeurs d'EOT ultra-minces.

Le Chapitre 3 présente tout d'abord le modèle tunnel développé pour rendre compte du courant dans un empilement high- $\kappa$ . A partir d'une description de charge incidente obtenue par simulation Poisson-Schrödinger, le courant de grille est modélisé par une approche basée sur la notion de transparence tunnel. Ce mémoire propose notamment différentes méthodes originales de calcul de la transparence dans un bi-couche IL - high- $\kappa$ , différant par leur domaine de validité et le type d'approche souhaité (analytique ou numérique).

Ce chapitre présente ensuite une étude expérimentale exhaustive du transport dans un empilement nMOS IL -  $\text{HfO}_2$  - TiN. Nous avons tout d'abord identifié que le courant de grille en régime d'inversion est assuré par les électrons confinés (gaz 2D) de la bande de conduction du Silicium. L'analyse de la séparation de porteurs, valide et applicable dans ce régime de fonctionnement, montre toutefois ses limites en accumulation. Seule la comparaison entre courants expérimental et théorique a permis de mettre en lumière l'origine de la conduction, à savoir un courant de trous confinés de la bande de valence du Silicium. Ce dernier point prend toute son importance car il montre une différence essentielle avec un empilement  $\text{SiO}_2$  - Polysilicium, dans lequel le courant en accumulation est un courant d'électrons 3D transitant du métal de grille vers la bande de conduction du Silicium.

Les mécanismes physiques à l'origine de la conduction ont ensuite été établis en comparant les caractéristiques  $I_g(Q_{sc})$  expérimentales d'empilements différant uniquement par leurs épaisseurs d'IL et de diélectrique high- $\kappa$ . Mesurées à différentes températures (de 80 à 400K) et confrontées à la simulation tunnel, leur analyse a permis d'établir les conclusions suivantes :

- L'oxyde  $\text{SiO}_2$  d'interface ne présente pas de pièges susceptibles d'assister thermiquement le courant. Dans cet oxyde, nous concluons en un mécanisme de type tunnel, en inversion comme en accumulation et quelle que soit la température.
- En inversion, le courant de grille présente une dépendance thermique importante, fonction de l'épaisseur de diélectrique high- $\kappa$ . Pour des épaisseurs supérieures à 3nm, le courant de grille est donc de type Poole-Frenkel ou TAT inélastique à température ambiante. Cette observation permet d'affirmer qu'il est impossible d'extraire les paramètres tunnel du  $\text{HfO}_2$  à température ambiante pour cette gamme d'épaisseur, contrairement à l'approche adoptée dans nombre d'études publiées ces dernières années. Il est néanmoins raisonnable de considérer que le transport est de type tunnel à température ambiante dans un

---

empilement présentant une épaisseur  $\text{HfO}_2$  ultra-mince (de l'ordre de 2nm). Par ailleurs, ces observations expérimentales sont cohérentes avec la présence d'une bande de pièges en volume du  $\text{HfO}_2$ , situés environ 1eV sous la bande de conduction du diélectrique.

- Enfin, le courant tunnel en accumulation ne présente aucune activation thermique, et ce quelle que soit l'épaisseur de high- $\kappa$ .

Pour les nœuds 32 nm et en deçà (EOT inférieur à 1 nm), nous concluons donc que le courant de grille dans un empilement high- $\kappa$  est un courant de type tunnel.

Nous avons également mis en lumière la difficulté à caractériser précisément un empilement diélectrique donné à partir des seules caractéristiques  $I_g(V_g)$  et  $C(V_g)$ . L'apport d'une gamme étendue de dispositifs ne différant que par leurs épaisseurs de diélectriques a ainsi permis de limiter au maximum le nombre d'hypothèses simplificatrices, et a permis d'extraire expérimentalement une permittivité du  $\text{HfO}_2$  égale à  $17\varepsilon_0$ . Des observations TEM complémentaires ont mis en évidence la nature sous-stœchiométrique  $\text{SiO}_x$  de l'IL dans le cas d'une couche ultra-mince ( $\approx 8\text{\AA}$ ) réalisée par nettoyage chimique (permittivité égale à  $5\varepsilon_0$ ). Un oxyde interfacial d'épaisseur comprise entre 1,2 et 2 nm réalisé par croissance thermique RTO présente quant à lui un comportement de type  $\text{SiO}_2$ . La connaissance des valeurs précises de permittivité a ensuite permis d'avoir toute confiance dans les épaisseurs physiques d'IL et de high- $\kappa$  déduites, et de réduire au strict minimum toute incertitude lors de l'extraction des paramètres tunnel. Nous avons ainsi pu souligner, et quantifier, le phénomène de recroissance de l'oxyde d'interface au cours des différents recuits inhérents au procédé de fabrication. Cette oxydation de l'interface du Silicium apparaît d'autant plus favorisée que l'IL est mince, le high- $\kappa$  jouant le rôle de réservoir d'éléments oxydants. Pour les EOT les plus minces, l'épaisseur d'IL visée s'écarte fortement de l'épaisseur réelle et la prise en compte de cette recroissance est apparue indispensable pour modéliser le plus finement possible le courant de grille.

Un jeu unique de paramètres tunnel a ensuite permis de rendre compte du courant de grille à basse température (80K) dans l'ensemble des dispositifs testés (excepté le cas  $t_{\text{HfO}_2} = 4,5\text{ nm}$  pour lequel le high- $\kappa$  présente une structure cristalline et donc des paramètres différents). L'approximation parabolique de la relation de dispersion des oxydes a été validée en régime d'inversion (courant 2D d'électrons de la bande de conduction), avec les paramètres  $\phi_{\text{HfO}_2} = 1,9\text{ eV}$ ,  $m_{\text{HfO}_2} = 0,165m_0$ ,  $\phi_{\text{IL}} = 3,1\text{ eV}$  et  $m_{\text{IL}} = 0,5m_0$ . En accumulation (courant 2D de trous de la bande de valence), cette approche a montré ses limites et une relation de dispersion de type Franz a dû être considérée pour reproduire le courant de grille (paramètres  $\phi_{\text{h,IL}} = 4,78\text{ eV}$ ,  $\phi_{\text{h,HfO}_2} = 2,83\text{ eV}$ ,  $m_{\text{f,IL}} = 0,5m_0$  et  $m_{\text{f,HfO}_2} = 0,22m_0$ ).

L'emploi d'un grand nombre d'empilements, de caractéristiques électriques mesurées à basse température, d'observations TEM et d'un modèle de courant tunnel pertinent a donc permis de caractériser pleinement les matériaux IL et  $\text{HfO}_2$  et d'aboutir au calcul de la relation de dispersion dans chacun des oxydes. Chacun des points cités s'est révélé indispensable, et il nous est donc apparu légitime d'étudier le cas pratique d'une étude expérimentale conventionnelle, c'est-à-dire l'étude d'un

unique empilement à travers ses caractéristiques  $I_g(V_g)$  et  $C(V_g)$ .

Le Chapitre 4 vise donc à appliquer l’approche suivie dans le Chapitre 3 à l’étude d’empilements en cours de développement pour les nœuds 32nm et en-deçà. L’analyse de la conduction électrique se propose d’apporter un éclairage nouveau sur le comportement électrique d’empilements dans lesquels des éléments Lanthane et Magnésium sont introduits pour décaler la tension de bandes plates et donc la tension de seuil de la structure MOS. La formation d’un dipôle à l’interface IL - high- $\kappa$  est attendue, décalant à la fois le travail de sortie effectif de la grille métallique et les hauteurs de barrière du diélectrique high- $\kappa$ .

La comparaison des caractéristiques  $I_g(Q_{sc})$  d’un transistor de référence  $\text{HfO}_2$  - TiN et d’un transistor  $\text{MgO}$  -  $\text{HfO}_2$  - TiN nous ont permis de mettre en évidence l’effet dipôle attendu. Pour la première fois, l’impact du dipôle sur la conduction dans le high- $\kappa$  a été établi : le décalage de  $V_{FB}$  induit par l’introduction de  $\text{MgO}$  (370mV) est cohérent avec l’évolution constatée de la conduction, à savoir un décalage équivalent des hauteurs de barrière du  $\text{HfO}_2$ . Toutefois, si notre approche s’est avérée pertinente pour juger qualitativement de l’effet dipôle sur le courant tunnel, la mesure quantitative de ce phénomène s’est heurtée à la méconnaissance de ces empilements, notamment l’évolution des paramètres tunnel du high- $\kappa$  après introduction d’éléments Magnésium. Signalons également que les paramètres tunnel IL et  $\text{HfO}_2$  établis dans le chapitre précédent nous ont permis de rendre compte du courant de grille dans l’empilement référence  $\text{HfO}_2$  (malgré des procédés de réalisation de l’empilement différents), sans aucun ajustement des paramètres de simulation.

Mesurer l’impact de l’introduction de Lanthane a été plus délicat en raison de l’absence d’empilement de référence  $\text{HfO}_2$ . Toutefois, l’étude poussée présentée dans le chapitre précédent a permis d’avoir une bonne confiance dans le rôle prospectif et prédictif de la simulation tunnel : les caractéristiques  $I_g(Q_{sc})$  des empilements de Lanthane ont donc été comparées à la simulation tunnel d’un empilement “virtuel”  $\text{HfO}_2$  et un effet dipôle a également été souligné, en bon accord avec les résultats expérimentaux.

Enfin, le Chapitre 5 étudie l’impact d’une description non-abrupte des interfaces entre les matériaux composant l’empilement de grille. Etablie par simulation atomistique ou caractérisation physico-chimique, la présence d’interfaces graduelles est susceptible de modifier l’effet de confinement et la simulation de courant dans l’empilement, par rapport à l’approche suivie jusqu’à présent.

Nous avons établi que la prise en compte d’une variation linéaire des paramètres des matériaux à l’interface Silicium - IL affecte à la fois la modélisation du confinement quantique et le transport tunnel. Toutefois, dans une approche expérimentale, la conjugaison de ces effets conduit à des extractions de paramètre tunnel identiques quelle que soit l’approche retenue pour décrire l’interface. Un même résultat a également été établi pour l’interface high- $\kappa$  - métal, à savoir la validité de l’approximation abrupte.

---

L'interface IL - high- $\kappa$  a été identifiée comme la plus critique pour la modélisation du transport : à EOT constant, les résultats de simulation tunnel diffèrent fortement en fonction de l'épaisseur de zone de transition retenue. Dans une approche expérimentale, l'extraction des paramètres tunnel du matériau high- $\kappa$  apparaît dépendante l'épaisseur de zone de transition considérée pour modéliser cette interface. Ce résultat de simulation implique néanmoins une variation de l'épaisseur physique totale de l'empilement en fonction de l'épaisseur de la zone de transition (variation nécessaire pour assurer un EOT constant). L'apport de moyens de caractérisation TEM devrait donc permettre de s'affranchir de toute incertitude sur l'évaluation de l'épaisseur physique, et minimiserait l'erreur qu'il est possible de commettre en considérant une description abrupte de l'interface IL - high- $\kappa$  (cas du Chapitre 3).

Le présent manuscrit fait donc état de notre contribution à l'étude de la conduction électrique dans un empilement high- $\kappa$ , essentielle et nécessaire pour optimiser les dispositifs des nœuds technologiques à venir. Tout au long de ces travaux, nous avons passé en revue et remis en cause un certain nombre d'approximations habituellement utilisées pour caractériser les diélectriques de grille. Parmi elles, considérer l'oxyde d'interface comme étant du  $\text{SiO}_2$  ou négliger la pénétration des fonctions d'onde dans l'empilement conduit à une extraction de paramètres uniquement phénoménologique et fort éloignée de la réalité physique de l'empilement. Gageons que ces points s'avéreront essentiels pour la modélisation et l'étude des empilements à venir, pour lesquels l'EOT visé approche le demi-nanomètre.



# Annexes





# Notions de physique des dispositifs semi-conducteurs

---

Nous introduisons ici les éléments essentiels à la compréhension de ces travaux de thèse. Le lecteur pourra retrouver ces notions plus amplement traitées dans la littérature, abondante à ce sujet [1, 2, 3, 4].

## 1 Structure de bande du Silicium

Le Silicium est un matériau semi-conducteur appartenant à la colonne IV de la classification périodique des éléments. Comme une majorité des composés présentant 4 électrons de valence (cas du Carbone et du Germanium), il cristallise dans une structure cubique à face centrée de type diamant.

La relation  $E-k$  du Silicium cristallin, tracée Figure A.1 représente l'ensemble des niveaux d'énergie que peut occuper un électron en fonction du nombre d'onde  $k$  et de sa direction. La structure de bande laisse apparaître une bande interdite, appelée *gap* du semi-conducteur, dans laquelle l'équation de Schrödinger ne trouve pas de solutions.

On peut distinguer deux zones en énergie :

- La bande de valence (énergies négatives) dont le maximum est centré en  $\Gamma$ . A une température de 0K, elle est pleine d'électrons.
- La bande de conduction (énergies positives) dont le minimum se situe en bord de zone de Brillouin : le Silicium a un gap qualifié d'*indirect*. A une température de 0K, cette bande est vide d'électrons.

Sous l'effet de la température ou d'un champ électrique, des électrons de la bande de valence (BV) transitent vers la bande de conduction (BC). Le Silicium devient ainsi conducteur grâce à la création de paires électrons BC - trous BV. Seuls ces porteurs, minoritaires dans chacune des deux bandes, permettent le transport de charges et donc le passage d'un courant. On remarquera la qualification du Silicium de matériau *semi-conducteur*.

### 1.1 Approximation de la masse effective

Dans l'approximation de la masse effective, les extrema des deux bandes de trous centrées en  $\Gamma$  sont considérés paraboliques suivant la relation :

$$E(k) = E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h}, \quad (\text{A.1})$$

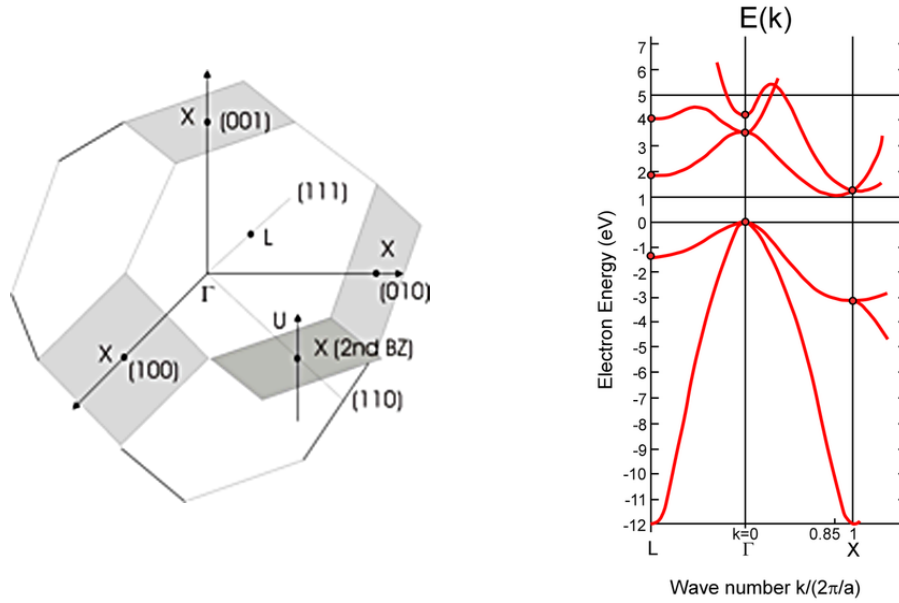


FIGURE A.1 – Première zone de Brillouin du Silicium et structure de bande correspondante. L'énergie  $E$  en eV y est représentée en fonction du nombre d'onde  $k$  en  $\text{m}^{-1}$  dans 3 directions particulières. (sources : <http://www.nanohub.org> et S. L. Hellstrom, Stanford University)

où  $E_v$  est le maximum de la bande de valence,  $\hbar$  la constante de Planck réduite et  $m_h$  la masse effective de la bande de trou considérée. Cette description est respectée quelle que soit la direction de  $k$ , aussi dit-on que la masse effective des trous est isotrope. Usuellement, on appelle  $m_{HH}$  la masse effective des trous lourds et  $m_{LH}$  celle des trous légers. Dans le paragraphe 5.2 du Chapitre 2, cette approximation est néanmoins remise en question et une description plus avancée de la structure de bande de valence du Silicium est introduite.

Pour des raisons de symétrie cristalline, la bande de conduction du Silicium présente 6 minima équivalents dans 6 directions différentes, qui peuvent également être approximés par une relation parabolique. En considérant une direction donnée, dans notre cas une direction de confinement  $z$  normale à l'interface Silicium - empilement de grille, 4 de ces minima possèdent une masse effective  $m_L$  et 2 autres une masse effective  $m_T$ .

Nous considérerons donc dans la suite 4 *familles* de porteurs : électrons L, électrons T, trous HH et trous LH.

## 1.2 Densité d'états tridimensionnelle (3D)

La densité d'états 3D  $g_{3D}$  s'exprime en  $\text{m}^{-3}$  et exprime le nombre d'états disponibles par unité de volume pour des électrons (selon qu'on considère la bande de

## 1. Structure de bande du Silicium

---

conduction) ou des trous (selon qu'on considère la bande de valence). La densité d'états 3D dans l'espace des  $\vec{k}$  est constante et donné par :

$$g_{3D}(\vec{k}) = \frac{2}{(2\pi)^3} \quad (\text{A.2})$$

En exprimant l'Equation A.2 en fonction de l'énergie, et en utilisant l'approximation parabolique des extrema de bande, la densité d'états s'écrit sous la forme :

$$g_{3D}(E) = \frac{1}{(2\pi)^2} \left( \frac{2m_{d,3D}}{\hbar^2} \right) (E - E_{c,v})^{1/2}, \quad (\text{A.3})$$

où  $E_{c,v}$  représente l'extremum de la bande de conduction ou de valence, suivant la zone considérée.  $m_{d,3D}$  est la *masse effective de densité d'état 3D* et s'exprime en fonction des masses effectives pour chacune des bandes par :

$$\begin{cases} m_{dc,3D} = \left( 6m_L^{1/2} m_T \right)^{2/3} \\ m_{dv,3D} = \left( m_{HH}^{3/2} + m_{LH}^{3/2} \right)^{2/3} \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

Une masse effective de densité d'état est indépendante de la direction, et peut-être considérée comme une masse effective moyennée dans toutes les directions.

En fonction des paramètres intrinsèques du Silicium cristallin, à savoir les masses effectives  $m_L$ ,  $m_T$ ,  $m_{HH}$  et  $m_{LH}$ , il est donc possible de calculer le nombre d'états disponibles pour un porteur en fonction de son énergie. La probabilité d'occupation d'un état libre est donnée par la statistique de Fermi, définie dans le paragraphe A.

### 1.3 Description d'un gaz bidimensionnel (2D) de porteurs

Dans une structure métal - oxyde - semi-conducteur l'application d'un champ électrique sur la grille confine un gaz 3D de porteurs (obéissant aux équations définies ci-dessus) dans un plan 2D. Les concepts de densité d'états et de masse effective de densité d'états sont alors redéfinies, l'Equation A.3 s'écrivant alors :

$$g_{2D}(\vec{k}) = \frac{2}{(2\pi)^2} \quad (\text{A.5})$$

Dans un gaz 2D confiné suivant un axe  $z$ , l'énergie totale d'un porteur est la somme d'une énergie quantifiée  $\varepsilon_n$  suivant  $k_z$  (obtenue en résolvant l'équation de Schrödinger) et d'une énergie continue  $E_{\parallel}$  suivant  $k_{\parallel}^2 = k_x^2 + k_y^2$ , le mouvement des porteurs restant libre dans le plan  $< xy >$  de l'interface. On a donc :

$$E = \varepsilon_n + E_{\parallel} = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m}, \quad (\text{A.6})$$

où  $m$  est la masse du porteur considéré.

## Annexe A. Notions de physique des dispositifs semi-conducteurs

---

Pour chaque sous-bande quantifiée  $n$ , la densité d'états est constante en fonction de l'énergie. Ainsi, en tenant compte de l'ensemble des sous-bandes, la densité d'états 2D est donnée par :

$$g_{2D}(E) = \frac{m_{d,2D}}{\pi \hbar^2} \sum_n H(E - \varepsilon_n), \quad (\text{A.7})$$

avec  $H$  fonction de Heavyside et les masses effectives de densité d'états 2D pour chaque famille de sous-bande :

$$\begin{cases} m_{dL,2D} = 2m_T \\ m_{dT,2D} = 4\sqrt{m_T m_L} \\ m_{dHH,2D} = 2m_{HH} \\ m_{dLH,2D} = 2m_{LH} \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

## 2 Statistique de Fermi-Dirac et calcul de charge

La position du niveau de Fermi d'un matériau semi-conducteur est fonction de la concentration d'espèces dopantes. Elle conditionne la concentration de trous dans la bande de valence et d'électrons dans la bande de conduction. On distingue 2 types de dopage :

- dopage n : Le niveau de Fermi est alors situé proche de la bande de conduction. Le matériau est ainsi considéré riche en électrons à température ambiante.
- dopage p : Le niveau de Fermi est situé proche de la bande de valence : le matériau est riche en trous.

La statistique de Fermi-Dirac pour un électron est donnée par :

$$f_e(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_F)/k_B T}}, \quad (\text{A.9})$$

et est la probabilité qu'un état à l'énergie  $E$  soit occupé par un électron, avec  $E_F$  le niveau de Fermi et  $k_B$  la constante de Boltzmann. Au zéro absolu, tous les états situés sous le niveau de Fermi sont pleins d'électrons. En augmentant  $T$ , l'agitation thermique permet l'occupation d'états d'énergie supérieure. Cette statistique est tracée Figure A.2 à  $T=0K$  et  $T=300K$ .

La statistique de Fermi pour les trous est simplement donnée par :

$$f_h(E) = 1 - f_e(E) = \frac{1}{1 + e^{-(E-E_F)/k_B T}} \quad (\text{A.10})$$

La formulation générale du calcul de la concentration de trous et d'électrons dans le Silicium est définie par :

$$N = \int_{E_C}^{+\infty} g_e(E) f_e(E) dE \quad (\text{A.11})$$

$$P = \int_{-\infty}^{E_V} g_h(E) f_h(E) dE \quad (\text{A.12})$$

## 2. Statistique de Fermi-Dirac et calcul de charge

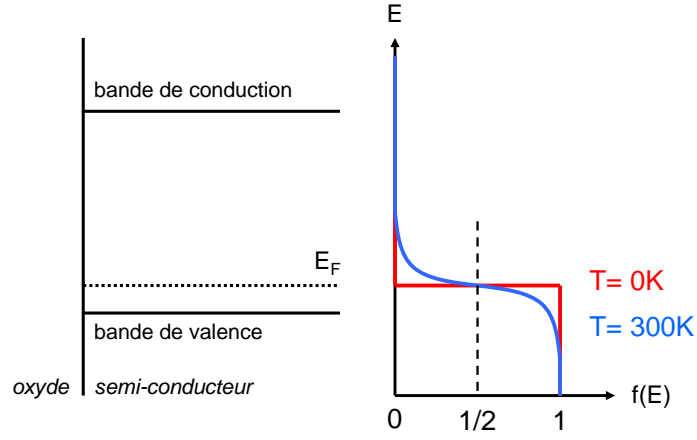


FIGURE A.2 – Statistique de Fermi tracée en regard d’une structure dopée p (niveau de Fermi proche de la bande de valence)

où  $g_e(E)$  et  $g_h(E)$  sont les densités d’états des bandes de conduction et de valence respectivement.

Dans le cas particulier d’un gaz bidimensionnel, nous avons vu que l’énergie  $\varepsilon_n$  est quantifiée et que la densité d’états de chaque famille de porteur est constante pour chaque sous-bande. Prenant exemple de la bande de conduction, on peut démontrer que la concentration par sous-bande  $n$  d’une famille d’électron L ou T est donné à partir de l’Equation A.11 par :

$$N_{n,L} = \frac{m_{dL,2D}}{\pi \hbar^2} k_B T \ln \left( 1 + e^{(E_F - \varepsilon_{n,L})/k_B T} \right) \quad (\text{A.13})$$

$$N_{n,T} = \frac{m_{dT,2D}}{\pi \hbar^2} k_B T \ln \left( 1 + e^{(E_F - \varepsilon_{n,T})/k_B T} \right) \quad (\text{A.14})$$

avec la charge totale pour chaque famille d’électrons :

$$Q_{L/T} = \sum_n e \cdot N_{n,L/T}, \quad (\text{A.15})$$

$e$  désignant la charge élémentaire de l’électron.

Les grandeurs définies dans les Equations A.13 et A.14 sont les concentrations totales dans l’ensemble du substrat Silicium. Leur dépendance spatiale suivant  $z$  s’exprime dans un cas 2D par :

$$\rho_{n,L}(z) = N_{n,L} |\psi_{n,L}|^2 \quad (\text{A.16})$$

$$\rho_{n,T}(z) = N_{n,T} |\psi_{n,T}|^2 \quad (\text{A.17})$$

avec  $\psi_{n,L}$  et  $\psi_{n,T}$  les fonctions d’onde normalisées correspondant aux états d’énergie  $\varepsilon_{n,L}$  et  $\varepsilon_{n,T}$ .

Nous voyons donc que la résolution de l'équation de Schrödinger est nécessaire pour simuler un gaz 2D de porteurs. Cette résolution est détaillée dans le Chapitre 2.

### 3 Grandeurs caractéristiques d'une structure MOS

L'application d'une polarisation de grille  $V_g$  sur un empilement métal - oxyde - semi-conducteur modifie le champ électrique dans le Silicium et la courbure de bandes  $V_s$  à l'interface oxyde - substrat. L'écart entre le niveau de Fermi et les bandes à l'interface diffère alors de l'écart volumique, et il en résulte une concentration de charge présentant une dépendance spatiale. Un schéma simplifié définissant les grandeurs utilisées dans cette section est proposé Figure A.3. La Figure A.4 illustre

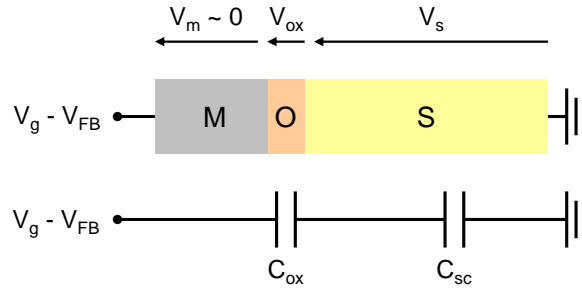


FIGURE A.3 – Structure métal - oxyde - semi-conducteur sous polarisation  $V_g$  et schéma électrique équivalent.

différents régimes de fonctionnement d'une structure nMOS (substrat p). Dans ce cas, les porteurs majoritaires (en volume) sont les trous, et les porteurs minoritaires les électrons. L'application d'une tension sur la grille modifie la concentration de charge à l'interface.

Dans le substrat Silicium, la densité totale de charge  $\rho_{\text{tot}}(z)$  en  $\text{C.m}^{-3}$  est :

$$\begin{aligned}\rho_{\text{tot}}(z) &= \rho_e(z) + \rho_h(z) + \rho_{\text{dep}}(z) \\ &= e(-\rho_L(z) - \rho_T(z) + \rho_{\text{HH}}(z) + \rho_{\text{LH}}(z) - Na)\end{aligned}\quad (\text{A.18})$$

avec  $e$  la charge de l'électron,  $z$  la direction de confinement,  $Na$  la concentration de dopants et l'ensemble des concentrations de porteurs libres résultant d'une somme sur toutes les sous-bandes confinées  $n$ .

La charge totale est ainsi fonction de la courbure de bande, à savoir  $V_s$ . Par unité de surface de grille, on a :

$$Q_{\text{sc}}(V_s) = \int \rho_{\text{tot}}(z) dz \quad (\text{A.19})$$

où  $Q_{\text{sc}}$  est exprimée en  $\text{C.m}^{-2}$ . Une fois connue la relation  $Q_{\text{sc}}(V_s)$ , la conservation du vecteur déplacement électrique  $\vec{D}$  donne la chute de potentiel  $V_{\text{ox}}$  dans le diélectrique

### 3. Grandeurs caractéristiques d'une structure MOS

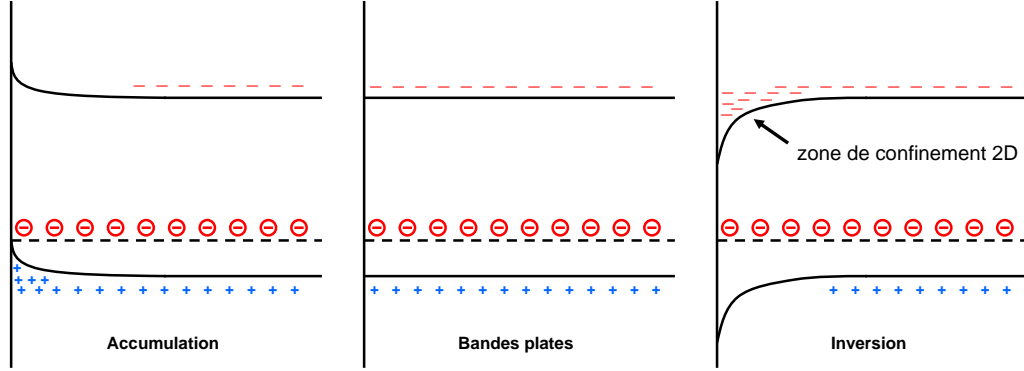


FIGURE A.4 – Représentation des 3 régimes de fonctionnement principaux d'une structure nMOS. Les porteurs libres majoritaires (trous) sont représentés en bleu et les libres minoritaires (électrons) en rouge. Leur concentration spatiale évolue suivant la courbure de bandes, et donc suivant la polarisation appliquée. Les charges négatives fixes des dopants ionisés (cercles de rouge) sont constantes dans le volume.

de grille :

$$V_{ox}(V_s) = \frac{t_{ox}}{\varepsilon_{ox}} \cdot Q_{sc}(V_s), \quad (A.20)$$

avec

- $t_{ox}$  : épaisseur physique de l'oxyde de grille,
- $\varepsilon_{ox}$  sa permittivité.

La caractéristique  $Q_{sc}(V_s)$  permet donc de déduire la polarisation de grille totale :

$$V_g(V_s) = V_s + V_{ox}(V_s) + V_{FB}, \quad (A.21)$$

où  $V_{FB}$  est la tension de bandes plates. La chute de potentiel  $V_m$  dans le métal de grille est ici négligée car considéré infiniment conducteur.

Enfin, la capacité de l'empilement de grille est définie par :

$$C = \left( \frac{1}{C_{ox}} + \frac{1}{C_s} \right)^{-1}, \quad (A.22)$$

avec :

$$C_s = \frac{\partial Q_{sc}(V_s)}{\partial V_s} \quad (A.23)$$



## Bibliographie

- [1] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*. Brooks Cole, 1976. [189](#)
- [2] H. Mathieu, *Physique des Semiconducteurs et des Composants Electroniques*. Dunod, 2001. [189](#)
- [3] E. H. Nicollian and J. R. Brews, *MOS (Metal Oxide Semiconductor) Physics and Technology*. Wiley-Interscience, 2002. [189](#)
- [4] S. M. Sze and K. K. Ng, *Physics of Semiconductor Devices*. Wiley-Interscience, 2006. [189](#)





# Modélisation de la transparence tunnel : approche d'Airy

Nous rappelons les grandeurs utilisées pour caractériser un empilement Si - IL - high- $\kappa$  - métal dans la Figure B.1. Certains de ces paramètres (masses tunnel et hauteurs de barrière) sont caractéristique d'un transport d'électrons depuis la bande de conduction du Silicium. Une approche équivalente peut être adoptée pour modéliser la transition tunnel de trous à partir de la bande de valence.

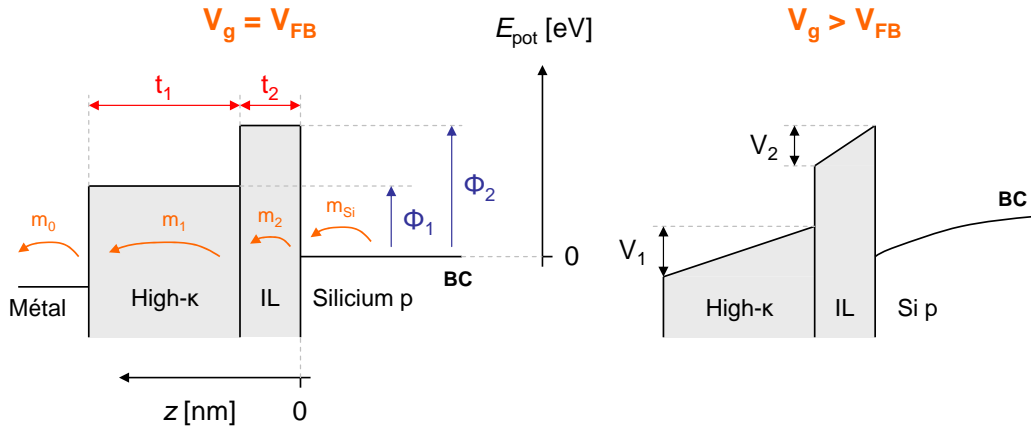


FIGURE B.1 – Définition des paramètres d'un empilement Si - IL - high- $\kappa$  - métal nécessaire à la modélisation de la transparence tunnel.

Nous définissons les zones suivantes :

- zone Si : bande de conduction du substrat Silicium. Une approche rigoureuse consisterait à considérer les solutions de l'équation de Schrödinger obtenues par résolution de l'auto-consistance. Néanmoins, la description des milieux émetteurs et récepteurs ayant peu d'influence sur la transparence calculée (prépondérance des paramètres tunnel de la barrière), nous considérons un profil d'énergie potentielle linéaire dans le substrat pour rendre compte de l'effet de champ.
- zone 2 : oxyde interfacial
- zone 1 : diélectrique high- $\kappa$
- zone  $m$  : métal de grille

## Annexe B. Modélisation de la transparence tunnel : approche d'Airy

La résolution de l'équation de Schrödinger est détaillée pour la barrière 2. La méthodologie est identique pour la barrière 1 et le substrat Silicium (potentiels linéaires avec  $z$ ).

L'énergie potentielle s'écrit :

$$E_{\text{pot}}(z) = \phi_2 - \frac{V_2}{t_2} z \quad (\text{B.1})$$

et permet d'écrire l'équation de Schrödinger unidimensionnelle dans l'approximation de la masse effective :

$$\frac{\partial^2 \varphi_2}{\partial z^2} - \frac{2m_2}{\hbar^2} \left( \phi_2 - \frac{V_2}{t_2} z - E \right) \varphi_2 = 0 \quad (\text{B.2})$$

Les fonctions d'Airy Ai et Bi sont solutions d'une équation différentielle de la forme  $y'' - xy = 0$ . Ecrire l'équation de Schrödinger sous cette forme impose le changement de variable  $z = \lambda(\rho - \beta)$  avec  $\lambda$  et  $\beta$  des constantes et  $\rho$  la nouvelle variable :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \varphi_2}{\partial \rho^2} + \frac{2m_2 \lambda^3}{\hbar^2} \frac{V_2}{t_2} \rho \varphi_2 - \frac{2m_2 \lambda^2}{\hbar^2} \left( \phi_2 - E + \frac{V_2}{t_2} \lambda \beta \right) \varphi_2 &= 0 \\ \text{soit } \frac{\partial^2 \varphi_2}{\partial \rho^2} - \rho \varphi_2 &= 0 \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

avec les conditions suivantes :

$$\begin{aligned} \lambda &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{t_2}{V_2} \right)^{1/3}, \\ \beta &= (E - \phi_2) \frac{t_2}{V_2} \lambda^{-1} \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

On en déduit les solutions générales de l'équation de Schrödinger :

$$\varphi_2(z) = C^+ \text{Ai}[\rho(z)] + C^- \text{Bi}[\rho(z)] \quad (\text{B.5})$$

avec  $C^+$  et  $C^-$  des constantes.

Appliquer cette approche à tout l'empilement de grille permet d'écrire la forme générale de l'ensemble des fonctions d'onde :

$$\begin{aligned} \varphi_{\text{Si}}(z) &= C_{\text{Si}}^+ \text{Ai}[\rho_{\text{Si}}(z)] + C_{\text{Si}}^- \text{Bi}[\rho_{\text{Si}}(z)] \\ \varphi_2(z) &= C_2^+ \text{Ai}[\rho_2(z)] + C_2^- \text{Bi}[\rho_2(z)] \\ \varphi_1(z) &= C_1^+ \text{Ai}[\rho_1(z)] + C_1^- \text{Bi}[\rho_1(z)] \\ \varphi_m(z) &= C_m^+ \exp[ik_m z] + C_m^- \exp[-ik_m z] \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

avec  $C_*^{+/-}$  des constantes et  $k_m$  la relation de dispersion parabolique des porteurs dans le métal de grille. La continuité des fonctions d'onde et des densités de courant de probabilité à une interface située au point  $a$  entre 2 matériaux  $i$  et  $i+1$  s'écrit :

---


$$\begin{aligned}
C_i^+ \text{Ai}[\rho_i(a)] + C_i^- \text{Bi}[\rho_i(a)] &= C_{i+1}^+ \text{Ai}[\rho_{i+1}(a)] + C_{i+1}^- \text{Bi}[\rho_{i+1}(a)] \\
\frac{C_i^+}{m_i \lambda_i} \text{Ai}'[\rho_i(a)] + \frac{C_i^-}{m_i \lambda_i} \text{Bi}'[\rho_i(a)] &= \\
\frac{C_{i+1}^+}{m_{i+1} \lambda_{i+1}} \text{Ai}'[\rho_{i+1}(a)] + \frac{C_{i+1}^-}{m_{i+1} \lambda_{i+1}} \text{Bi}'[\rho_{i+1}(a)]
\end{aligned} \tag{B.7}$$

relations qui s'expriment sous forme matricielle :

$$\begin{aligned}
&\begin{pmatrix} \text{Ai}[\rho_i(a)] & \text{Bi}[\rho_i(a)] \\ (m_i \lambda_i)^{-1} \text{Ai}'[\rho_i(a)] & (m_i \lambda_i)^{-1} \text{Bi}'[\rho_i(a)] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_i^+ \\ C_i^- \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \text{Ai}[\rho_{i+1}(a)] & \text{Bi}[\rho_{i+1}(a)] \\ (m_{i+1} \lambda_{i+1})^{-1} \text{Ai}'[\rho_{i+1}(a)] & (m_{i+1} \lambda_{i+1})^{-1} \text{Bi}'[\rho_{i+1}(a)] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{i+1}^+ \\ C_{i+1}^- \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{B.8}$$

Les équations de continuité peuvent ainsi s'écrire sous la forme de produits de matrices de passage S :

$$S_i[\rho_i(a)] \begin{pmatrix} C_i^+ \\ C_i^- \end{pmatrix} = S_{i+1}[\rho_{i+1}(a)] \begin{pmatrix} C_{i+1}^+ \\ C_{i+1}^- \end{pmatrix} \tag{B.9}$$

et donc :

$$\begin{pmatrix} C_{i+1}^+ \\ C_{i+1}^- \end{pmatrix} = S_{i+1}[\rho_{i+1}(a)]^{-1} \cdot S_i[\rho_i(a)] \cdot \begin{pmatrix} C_i^+ \\ C_i^- \end{pmatrix} \tag{B.10}$$

Dans le métal de grille, la matrice de passage est fonction de la relation de dispersion  $k_m(E)$  :

$$S_m(z) = \begin{pmatrix} \exp(ik_m z) & \exp(-ik_m z) \\ \frac{ik_m}{m_0} \exp(ik_m z) & -\frac{ik_m}{m_0} \exp(-ik_m z) \end{pmatrix} \tag{B.11}$$

Il est désormais possible de calculer la relation entre les coefficients  $C_m^{+/-}$  (caractéristiques du courant transmis) et  $C_{Si}^{+/-}$  (caractéristiques du courant incident) :

$$\begin{pmatrix} C_m^+ \\ C_m^- \end{pmatrix} = M \cdot \begin{pmatrix} C_{Si}^+ \\ C_{Si}^- \end{pmatrix} \tag{B.12}$$

avec :

$$\begin{aligned}
M &= S_m[t_1 + t_2] \cdot S_1[\rho_1(t_1 + t_2)] \cdot \\
&S_1[\rho_1(t_2)]^{-1} \cdot S_2[\rho_2(t_2)] \cdot S_2[\rho_2(0)]^{-1} \cdot S_{Si}[\rho_{Si}(0)]
\end{aligned} \tag{B.13}$$

La transparence, rapport entre courant incident et courant transmis, s'exprime finalement selon l'Equation 3.6 définie page 71 :

$$T_{\text{Airy}}(E) = \frac{k_{Si}}{k_m} \frac{m_0}{m_{Si}} \frac{\det(M)^2}{|M_{2,2}|^2} \tag{B.14}$$



# Bibliographie de l'auteur

---

## Conférences internationales

- J. Coignus**, R. Clerc, C. Leroux, G. Reimbold and G. Ghibaudo, “*Analytical Modeling of Tunneling Current through SiO<sub>2</sub>-HfO<sub>2</sub> Stacks in MOS Structures*”, 15<sup>th</sup> Workshop on Dielectrics in Microelectronics (WoDiM), Juin 2008, Bad Saarow (Berlin), Allemagne
- J. Coignus**, C. Leroux, R. Clerc, G. Ghibaudo, G. Reimbold and F. Boulanger, “*Experimental Investigation of Transport Mechanisms through HfO<sub>2</sub> Gate Stacks in nMOS Transistors*”, 39<sup>th</sup> European Solid-State Device Research Conference (ESSDERC), Septembre 2009, Athènes, Grèce  
doi :[10.1109/ESSDERC.2009.5331318](https://doi.org/10.1109/ESSDERC.2009.5331318)
- J. Coignus**, R. Clerc, C. Leroux, G. Ghibaudo, G. Reimbold and F. Boulanger, “*Impact of Hole Non Parabolicity on EOT extraction from CV measurements*”, 41<sup>st</sup> IEEE Semiconductor Interface Specialists Conference (SISC), Décembre 2009, Arlington VA, Etats-Unis
- Q. Rafhay, R. Clerc, **J. Coignus**, G. Pananakakis and G. Ghibaudo, “*Dark Space, Quantum Capacitance and Inversion Capacitance in Si, Ge, GaAs and In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As nMOS Capacitors*”, 11<sup>th</sup> International Conference on Ultimate Limits of Integration in Semiconductors (ULIS), Mars 2010, Glasgow, Ecosse
- X. Garros, L. Brunet, M. Rafik, **J. Coignus**, G. Reimbold, E. Vincent, A. Bravaix and F. Boulanger, “*PBTI mechanisms in La containing Hf-based assessed by very fast IV measurements*”, 2010 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM), Décembre 2010, San Francisco CA, Etats-Unis
- G. Ghibaudo, **J. Coignus**, M. Charbonnier, J. Mitard, C. Leroux, X. Garros, R. Clerc and G. Reimbold, “*Recent Findings in Electrical Behavior of CMOS High-K Dielectric/Metal Gate Stacks*”, 219<sup>th</sup> International ECS Symposium, Mai 2011, Montréal, Canada



## Journaux avec comité de lecture

- J. Coignus**, R. Clerc, C. Leroux, G. Reimbold, G. Ghibaudo and F. Boulanger, “*Analytical modeling of tunneling current through  $\text{SiO}_2$ - $\text{HfO}_2$  stacks in metal oxide semiconductor structures*”, Journal of Vacuum Science & Technology B (JVST B), volume 27, n° 1, pages 338 – 245, 2009 doi :[10.1116/1.3043539](https://doi.org/10.1116/1.3043539)
- J. Coignus**, C. Leroux, R. Clerc, R. Truche, G. Ghibaudo, G. Reimbold and F. Boulanger, “*HfO<sub>2</sub>-based gate stacks transport mechanisms and parameter extraction*”, Solid-State Electronics (SSE), volume 54, n° 9, pages 972 – 978, 2009 doi :[10.1016/j.sse.2010.04.016](https://doi.org/10.1016/j.sse.2010.04.016)







---

## Etude de la conduction électrique dans les diélectriques à forte permittivité utilisés en microélectronique

A partir du nœud technologique 45 nm, le remplacement de l'oxyde de grille  $\text{SiO}_2$  par un diélectrique high- $\kappa$  est nécessaire pour poursuivre la loi de Moore : l'introduction d'un tel matériau permet de maintenir une capacité de grille élevée tout en limitant le courant de fuite parasite à travers la couche diélectrique. Toutefois, les mécanismes physiques à l'origine de la réduction de courant restent méconnus.

Ce manuscrit présente une étude complète de la conduction électrique dans un empilement oxyde d'interface - high- $\kappa$  - grille métallique. Nous présentons dans un premier temps la modélisation Poisson-Schrödinger développée pour rendre compte de l'effet de confinement à l'interface du Silicium, prenant en compte la pénétration de charge dans l'empilement et traitant de la non-parabolicité de la bande de valence. Une étude expérimentale étendue met ensuite en évidence les mécanismes physiques à l'origine de la conduction, en s'appuyant sur un ensemble de caractéristiques  $I_g(V_g)$  et  $C(V_g)$  d'empilements d'épaisseurs variables, mesurées à basse et haute température. Des approches originales pour modéliser le transport permettent également d'établir les paramètres tunnel et la structure de bande du  $\text{HfO}_2$ , tout en soulignant la nature sous-stœchiométrique de l'oxyde d'interface. Enfin, ces résultats sont appliqués à l'étude de la conduction dans des empilements high- $\kappa$  avec additifs Lanthane et Magnésium, et mettent en évidence la formation d'un dipôle contribuant à diminuer la tension de seuil.

**Mots-clés :** microélectronique, MOSFET,  $\text{HfO}_2$ , Poisson-Schrödinger, courant tunnel, dipôle

---

## Electrical conduction in high- $\kappa$ -based gate stacks of advanced CMOS technology

Since 45 nm node, the replacement of conventional  $\text{SiO}_2$  oxide by a high-permittivity dielectric has become mandatory to continue Moore's law : such material enables to keep high gate capacitance values while reducing gate leakage current. However, a complete understanding of gate leakage mechanisms through high- $\kappa$ -based gate stacks has not been reached yet.

This thesis analyses electrical conduction in interfacial layer - high- $\kappa$  dielectric - metal gate stacks. Quantum confinement modeling is first presented, by means of self-consistent Poisson-Schrödinger resolution accounting for both wavefunction penetration into the gate stack as well as valence band anisotropy. Then, a complete experimental study highlights the physical mechanisms responsible for gate leakage current, relying on the  $I_g(V_g)$  and  $C(V_g)$  electrical characteristics of various nMOS gate stacks with different dielectric thicknesses, measured at low and high temperature. Original models for gate current computation are also proposed, in order to establish both  $\text{HfO}_2$  tunneling parameters and band structure within an experimental approach. Finally, the influence of La- and Mg- capping layers on gate leakage is studied, and the presence of a dipole responsible for threshold voltage shift is experimentally confirmed.

**Keywords :** microelectronic, MOSFET,  $\text{HfO}_2$ , Poisson-Schrödinger, tunneling current, dipole

---